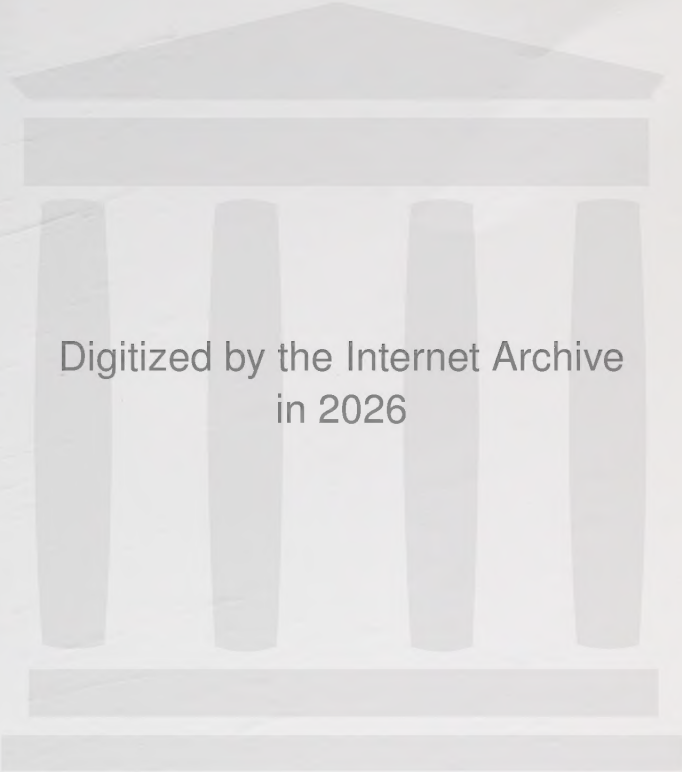


SPEKTRALE EIGENSCHAFTEN VON
LIOUVILLEOPERATOREN UND IHRE ANWENDUNG
IN DER STATISTISCHEN MECHANIK

HERBERT SPOHN

1975



Digitized by the Internet Archive
in 2026

SPEKTRALE EIGENSCHAFTEN VON LIOUVILLEOPERATOREN
UND IHRE ANWENDUNG IN DER STATISTISCHEN MECHANIK

Inaugural-Dissertation
zur Erlangung des Doktorgrades
des Fachbereichs Physik
der Ludwig-Maximilians-Universität München

vorgelegt von
Herbert Spohn
München, Dezember 1974



1. Berichterstatter: Priv.-Doz. Dr. W. Ochs
 2. Berichterstatter: Prof. Dr. H. J. Meister
- Tag der mündlichen Prüfung: 14. März 1975

Zusammenfassung

(1) Das Streben zum Gleichgewicht eines physikalischen Systems läßt sich in der klassischen statistischen Mechanik als Relaxation des entsprechenden Hamiltonschen Systems genau fassen. Dabei heißt ein Hamiltonsches System relaxierend, wenn der Erwartungswert jeder Observablen bei beliebigem Anfangszustand für $t \rightarrow \infty$ gegen einen festen Wert strebt. Bei einem relaxierenden Hamiltonschen System strebt für $t \rightarrow \infty$ jeder gebundene Anfangszustand im Sinn der schwachen Topologie gegen einen stationären Zustand.

(2) Wir untersuchen die Frage, welche Hamiltonschen Systeme relaxieren.

(3) Diese Frage ist eng mit den spektralen Eigenschaften der zugehörigen Liouvilleoperatoren verknüpft: (a) Ist das Spektrum des Liouvilleoperators eines Hamiltonschen Systems bis auf die Null absolut stetig, dann ist dieses System relaxierend. (b) Der Eigenraum zum Eigenwert Null eines Liouvilleoperators charakterisiert gebundene Zustände und Streuzustände des Systems.

(4) Die mathematische Untersuchung des Spektrums von Liouvilleoperatoren ist noch nicht abgeschlossen. Wir können die spektralen Eigenschaften von Liouvilleoperatoren zu separierbaren Hamiltonschen Systemen vollständig angeben. Im allgemeinen Fall läßt sich das Punktspektrum charakterisieren.

(5) Alle anharmonische separierbare Hamiltonsche Systeme sind relaxierend.

(6) Bei idealen Gasen stimmt der sich nach der Rechnung für $t \rightarrow \infty$ ergebende Zustand mit dem beobachteten Gleichgewichtszustand überein. Druck und Temperatur gleichen sich aus. Die Entropie nimmt zu.

(7) Die Relaxation ist eine schwächere Eigenschaft eines Hamiltonschen Systems als das Mischen fast all seiner ergodischen Komponenten.

(8) Im Gegensatz zur klassischen statistischen Mechanik relaxieren in der Quantenmechanik nur Streuzustände.

Inhaltsverzeichnis

	<u>Seite</u>
1. Einleitung	7
2. Relaxierende Hamiltonsche Systeme	9
2.1 Die Hilbertraumformulierung der klassischen statistischen Mechanik	
2.2 Relaxierende und schwach relaxierende Hamiltonsche Systeme	
2.3 Gebundene Zustände und Streuzustände	
2.4 Relaxation eines Hamiltonschen Systems und die spektralen Eigenschaften seines Liouvilleoperators	
2.5 Die präzisierte Fragestellung	
2.6 Ein historischer Exkurs	
3. Ein Seitenblick auf die Quantenmechanik	25
3.1 Relaxierende quantenmechanische Systeme	
3.2 Relaxation eines quantenmechanischen Systems und die spektralen Eigenschaften seines Hamiltonoperators	
3.3 Diskussion	
4. Ein Vergleich mit der Ergodentheorie	29
4.1 Abstrakte dynamische Systeme	
4.2 Zerlegung eines Hamiltonschen Systems in ergodische Komponenten	
4.3 Die Hierarchie der Begriffe des 'Strebens zum Gleichgewicht'	
4.4 Das Problem eines vollständigen Satzes von Invarianten	
5. Das Spektrum von Liouvilleoperatoren	38
5.1 Eine Vermutung	
5.2 Separierbare Hamiltonsche Systeme	
5.3 Der allgemeine Fall	
6. Hamiltonsche Systeme der klassischen statistischen Mechanik	45
7. Anwendung auf einfache Systeme der statistischen Mechanik	49
7.1 Isothermer Druckausgleich beim idealen Gas	
7.2 Druck- und Temperatúrausgleich beim idealen Gas	
7.3 Das Problem der thermodynamischen Interpretation stationärer Zustände	

8. Zum Problem der Irreversibilität	55
8.1 Entropiezunahme	
8.2 Der Umkehrreinwand von Loschmidt	
8.3 Der Wiederkehrreinwand von Zermelo	

Mathematischer Teil

M1. Das Spektrum von Hamiltonoperatoren und der Limes $t \rightarrow \infty$ quantenmechanischer Erwartungswerte	60
M2. Das Spektrum von Liouvilleoperatoren und der Limes $t \rightarrow \infty$ klassischer Erwartungswerte	68
M3. Invariante Mengen Hamiltonscher Systeme	71
M4. Spektrale Eigenschaften von Liouvilleoperatoren separierbarer Hamiltonscher Systeme	76
M4.1 Vorbemerkungen und Notationen	
M4.2 Ein Zerlegungssatz	
M4.3 Das Spektrum	
M5. Beispiele zu M4	89
M5.1 Der harmonische Oszillator	
M5.2 Potentialtopf	
M5.3 Das Keplerproblem	
M5.4 Ergodische Komponenten	
M6. Spektrale Eigenschaften von Liouvilleoperatoren (der allgemeine Fall)	94
Anhang 1	97
Anhang 2	99
Anhang 3	101
Anhang 4	103
Verzeichnis der mathematischen Symbole	104
Literaturverzeichnis	106

1. Einleitung

Betrachten wir als Beispiel den Gay-Lussacschen Expansionsversuch. Nach Öffnen des Hahns strömt das Gas in das Vakuum hinein und innerhalb von Bruchteilen von Sekunden stellt sich ein thermodynamisches Gleichgewicht mit konstanter Temperatur und konstantem Druck ein. Die Frage ist, wie man dieses Streben zum Gleichgewicht des Gases auf Grund seiner Dynamik verstehen kann.

Als Beitrag zu diesem Problemkreis wollen wir in der vorliegenden Arbeit die Frage untersuchen, unter welchen Bedingungen an die dynamischen Gesetze eines physikalischen Systems ein vorgegebener Anfangszustand für große Zeiten (d.h. für $t \rightarrow \infty$) gegen einen Gleichgewichtszustand strebt.

Diese so formulierte Fragestellung ist zugegebenermaßen noch ziemlich weitläufig und unbestimmt. Vor allem ist zu klären, welche Klasse von physikalischen Systemen wir betrachten, was unter einem Gleichgewichtszustand zu verstehen ist und im Sinn welcher Topologie das Streben gemeint ist. Bevor wir aber unsere Problemstellung genau fassen können, müssen wir eine Reihe von Begriffen einführen. Dies soll im folgenden Abschnitt geschehen. Wir verschieben deswegen auch einen Überblick über die historische Entwicklung und die Diskussion der neueren Arbeiten zu dieser Fragestellung auf das Ende des zweiten Abschnitts.

Wir beschränken uns im folgenden auf Systeme der klassischen statistischen Mechanik. In Abschnitt 3 wird dies im einzelnen begründet. Es zeigt sich, daß ein grundlegender Zusammenhang zwischen dem Streben zum Gleichgewicht eines klassischen Systems und den spektralen Eigenschaften seines Liouvilleopera-

tors besteht. Mathematisch konzentrieren wir uns also auf die Untersuchung des Spektrums von Liouvilleoperatoren (Abschnitt 5). Diese Ergebnisse werden dann in Abschnitt 6 und 7 auf charakteristische Systeme der statistischen Mechanik (ideales Gas, Gas mit Paarwechselwirkung) angewandt. Schließlich vergleichen wir in Abschnitt 4 unseren Ansatz mit dem der Ergodentheorie und diskutieren in Abschnitt 8 ein Beispiel, das uns im Zusammenhang mit dem Problem der Irreversibilität wichtig scheint.

Wir haben ein Verzeichnis der verwendeten mathematischen Symbole angefügt. Dabei haben wir uns bei funktionalanalytischen Begriffen an die Definitionen und Bezeichnungen von Reed und Simon [59] und bei maß- und wahrscheinlichkeitstheoretischen an die von Bauer [5] gehalten.

Abschließend sei noch ein Wort zu dem Aufbau der Arbeit gesagt. Wir haben einen mathematischen Teil abgetrennt, der für sich genommen einigermaßen abgeschlossen ist (soweit dies ohne allzu langatmige Wiederholungen möglich war). In den physikalischen Teil haben wir nur die Ergebnisse übernommen, die uns für die physikalische Argumentation wichtig schienen. Wir hoffen, daß dadurch der physikalische Gedankengang an Klarheit und Übersicht gewinnt. Leser, die sich nicht so sehr für die mathematischen Einzelheiten interessieren, seien trotzdem auf Abschnitt M5 hingewiesen. Die dort aufgeführten Beispiele dienen hoffentlich dazu, die manchmal unvermeidlich abstrakten Ausführungen anschaulich zu verstehen.

2. Relaxierende Hamiltonsche Systeme

2.1 Die Hilbertraumformulierung der klassischen statistischen Mechanik

Der Zustand eines mechanischen Systems mit N Freiheitsgraden wird durch einen Punkt x im Phasenraum Γ beschrieben. Γ ist eine offene und zusammenhängende Teilmenge des $\mathbb{R}^{2N}$ versehen mit dem $2N$ -dimensionalen Lebesgueschen Maß μ . Die Dynamik des Systems beschreibt eine einparametrische Gruppe T_t kanonischer Transformationen von Γ auf Γ (auch Phasen- oder Hamiltonsche Strömung) ^{*)}. $\{T_t x_0 | t \in \mathbb{R}\}$ ist die Phasenbahn des Systems bei zur Zeit $t = 0$ vorgegebenem Anfangszustand x_0 . Das Tripel (Γ, μ, T_t) nennen wir ein Hamiltonsches System.

Der kanonischen Gruppe T_t ist bis auf eine Konstante eindeutig eine (zweimal stetig differenzierbare) Hamiltonfunktion $H: \Gamma \rightarrow \mathbb{R}$ so zugeordnet, daß T_t die Lösungsschar der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen

$$\frac{d}{dt} x(t) = [x, H] \quad (2.1)$$

ist $[1,50]$ ⁺⁺⁾.

Observable eines mechanischen Systems sind reellwertige meßbare Funktionen auf Γ . Diese Wahl der Funktionenklasse ist durch die Art unserer mathematisch-physikalischen Fragestellung bedingt. Die Menge der Observablen ist durch die Mechanik nicht

^{*)} Alle kanonischen Transformationen werden hier als zweimal stetig differenzierbar vorausgesetzt. T_t ist zweimal stetig differenzierbar in t .

⁺⁺⁾ $[.,.]$ sind die Poissonklammern; siehe Anhang 1a).

eindeutig bestimmt. Observable sind etwa in der differentialgeometrischen Formulierung der Mechanik beliebig oft differenzierbare Funktionen auf der Mannigfaltigkeit, in dem C^* -Algebra-Ansatz zur statistischen Mechanik hingegen stetige, im Unendlichen verschwindende Funktionen.

In der klassischen statistischen Mechanik wird der Zustand eines Systems durch ein absolut stetiges Wahrscheinlichkeitsmaß $\rho d\mu$ auf Γ beschrieben. Die Wahrscheinlichkeitsdichte ρ ist eine reellwertige meßbare Funktion mit

$$\rho \geq 0 \quad \text{und} \quad \int_{\Gamma} \rho d\mu = 1 . \quad (2.2)$$

Der Erwartungswert einer Observablen f im Zustand ρ ist definiert als

$$\langle f \rangle_{\rho} = \int_{\Gamma} f \rho d\mu . \quad (2.3)$$

Durch die dynamische Entwicklung des Systems wird der Zustand und somit der Erwartungswert zeitabhängig:

$$\rho(t) = \rho \circ T_{-t} \quad (2.4)$$

$$\langle f \rangle_{\rho}(t) = \int_{\Gamma} f \rho \circ T_{-t} d\mu . \quad (2.5)$$

Für unsere weitere Untersuchung ist es äußerst zweckmäßig, den Hilbertraum $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(\Gamma, d\mu)$ mit dem Skalarprodukt

$$\langle g | f \rangle = \int_{\Gamma} g^*(x) f(x) d\mu(x) \quad (2.6)$$

einzuführen. Dann induziert die kanonische Gruppe T_t durch

$$(f \cdot T_t)(\cdot) = (U(t)f)(\cdot) \quad (2.7)$$

für alle $f \in \mathcal{K}$ eine Gruppe $U(t)$ linearer Operatoren in $\mathcal{K}$. Da nach dem Liouvilleschen Satz T_t das Lebesguesche Maß μ erhält, ist $U(t)$ eine einparametrische, stark stetige unitäre Gruppe (Satz von Koopman [34]). Nach dem Satz von Stone existiert also ein selbstadjungierter Operator L in $\mathcal{K}$, so daß

$$U(t) = e^{iLt} \quad (2.8)$$

L ist der Liouvilleoperator des Hamiltonschen Systems (Γ, μ, T_t) . Nach einem Lemma von Hunziker [28]⁺⁾ ist

$$L = i[H, \cdot] \quad (2.9)$$

auf einem geeignet gewählten Definitionsbereich $D(L) \subset \mathcal{K}$. Der Liouvilleoperator ist immer ein unbeschränkter Operator (ausgenommen in dem Fall $L = 0$ bzw. $H = \text{const.}$).

Wir fordern nun, daß Zustände und Observable quadratintegrabel sind. Dies bedeutet für die Zwecke der statistischen Mechanik keine Einschränkung, da wegen der endlichen räumlichen Ausdehnung des Systems der Phasenraum sich immer in kompakte invariante Teilmengen zerlegen läßt. Mit (2.4) bis (2.8) gilt dann offensichtlich

⁺⁾ Siehe Anhang 1b).

$$\rho(t) = e^{-iLt} \rho \quad \text{und} \quad (2.10)$$

$$\langle f \rangle_{\rho}(t) = \langle e^{-iLt} \rho | f \rangle = \langle \rho | U(t) f \rangle \quad . \quad (2.11)$$

2.2 Relaxierende und schwach relaxierende Hamiltonsche Systeme

Wir wollen nun in geeigneter Weise definieren, wann ein Hamiltonsches System ein Streben zum Gleichgewicht zeigt. In Experimenten etwa mit verdünnten Gasen beobachtet man, daß bei allen im Labor realisierbaren Anfangszuständen die Dichte, die mittlere Geschwindigkeit, die Temperatur, der Wärmestrom, der Drucktensor und vielleicht noch einige andere Größen sich rasch ihrem Gleichgewichtswert nähern ^{*)}. Diese Erwartungswerte von mechanischen Observablen relaxieren also gegen einen zeitlich konstanten Wert.

In starker Verallgemeinerung nennen wir ein Hamiltonsches System (Γ, μ, T_t) relaxierend, wenn der Erwartungswert jeder Observablen $f \in \mathcal{L}^2(\bar{\Gamma}, d\mu)$ bei beliebigem Anfangszustand $\rho \in \mathcal{L}^2(\bar{\Gamma}, d\mu)$ für $t \rightarrow \infty$ gegen einen festen Wert strebt. Nicht notwendig, aber mathematisch angenehm ist es, diese Definition auf beliebige komplexwertige Funktionen, soweit sie Elemente des Hilbertraums $\mathcal{L}^2(\bar{\Gamma}, d\mu)$ sind, auszudehnen.

Um den von dem Anfangszustand ρ und der Observablen f abhängigen Grenzwert des Erwartungswerts $\langle \rho(t) | f \rangle$ für $t \rightarrow \infty$ handlich auszudrücken, benötigen wir noch eine vorbereitende Definition. Sei (Γ, μ, T_t) ein Hamiltonsches System mit nach (2.7) induzierter unitärer Gruppe $U(t) = e^{iLt}$. Mit P_0 bezeichnen wir

^{*)} Wir betrachten hier nur abgeschlossene Systeme.

dann den Projektionsoperator auf den Eigenraum zum Eigenwert Null von L . Der Unterraum $P_0 \mathcal{K}$ ist gleich der Menge aller quadratintegrablen Konstanten der Bewegung. $f \in P_0 \mathcal{K}$ ist nämlich äquivalent zu $f \in \mathcal{K}$ und

$$(f \cdot T_t)(x) = f(x) \quad (2.12)$$

für alle $t \in \mathbb{R}$ und fast alle $x \in \Gamma$.

Wir gelangen somit zu

Definition 2.1. Sei (Γ, μ, T_t) ein Hamiltonsches System mit induzierter unitärer Gruppe $U(t)$. Gilt für alle $f, g \in \mathcal{K}$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle g | U(t) f \rangle = \langle g | P_0 f \rangle, \quad (2.13)$$

dann heißt das Hamiltonsche System (Γ, μ, T_t) relaxierend ^{*)}.

Bei geeigneten Bedingungen an $P_0 \mathcal{K}$ ⁺⁺⁾, die bei Systemen endlicher räumlicher Ausdehnung immer erfüllt sind, ist mit ρ auch $P_0 \rho$ ein Zustand. Definition 2.1 ist dann physikalisch auch so interpretierbar: Ein beliebiger Anfangszustand strebt bei einem relaxierenden Hamiltonschen System für $t \rightarrow \infty$ im Sinn des schwachen Limes gegen einen stationären (d.h. zeitunabhängigen) Zustand. ⁺⁺⁺⁾.

^{*)} Der Begriff relaxierend stammt von Hobson [23], die Definition selbst von Hopf [26]. Vgl. Abschnitt 2.6.

⁺⁺⁾ Vgl. Abschnitt 2.3.

⁺⁺⁺⁾ Bei einem relaxierenden Hamiltonschen System gilt für die Autokorrelationsfunktion $\langle f | U(t) f \rangle$ von Observablen der Form $f = Lg$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle f | U(t) f \rangle = 0 \quad \text{und} \quad \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t \langle f | U(s) f \rangle ds = 0.$$

(siehe Abschnitt M2). Dies im Rahmen der Transporttheorie wichtige Ergebnis wurde von Lebowitz [40] für mischende Systeme bewiesen. Man vgl. dazu auch die Diskussion in [64].

Es erweist sich als sinnvoll, Definition 2.1 noch etwas abzuschwächen.

Definition 2.2. Sei (Γ, μ, T_t) ein Hamiltonsches System mit induzierter unitärer Gruppe $U(t)$. Gilt für alle $f, g \in \mathfrak{X}$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t |\langle g | U(s)f \rangle - \langle g | P_0 f \rangle|^2 ds = 0, \quad (2.14)$$

dann heißt (Γ, μ, T_t) schwach relaxierend.

Koopman und von Neumann [35] haben gezeigt, daß es sich hierbei um eine physikalisch unwesentliche Abschwächung von Definition 2.1 handelt. Schließt man aus der Zeitachse $\mathbb{R}$ eine feste (nur von dem vorgegebenen Hamiltonschen System abhängige) Menge B der Dichte Null ^{*)} aus, dann gilt auf $\mathbb{R} \setminus B$ der Limes (2.13)

Der Vollständigkeit wegen führen wir noch einen dritten Begriff ein. (Dies erleichtert den späteren Vergleich mit der Ergodentheorie.)

Definition 2.3. Sei (Γ, μ, T_t) ein Hamiltonsches System mit induzierter unitärer Gruppe $U(t)$. Gilt für alle $f, g \in \mathfrak{X}$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t \langle g | U(s)f \rangle ds = \langle g | P_0 f \rangle, \quad (2.15)$$

dann heißt (Γ, μ, T_t) im zeitlichen Mittel relaxierend.

Der Ergodensatz von von Neumann [46] besagt gerade, daß der Limes (2.15) immer existiert. Alle Hamiltonschen Systeme sind also im zeitlichen Mittel relaxierend. Dies entspricht auch dem physikalischen Verständnis, wonach das zeitliche Mittel eines Er-

^{*)} Siehe Anhang 1c).

wartungswertes immer existieren sollte.

Es ist zu betonen, daß die Auszeichnung der Zeitrichtung $t \rightarrow +\infty$ rein konventionell ist. In den Definitionen 2.1 bis 2.3 hätten wir genauso gut $\lim t \rightarrow -\infty$ setzen können. Bei den drei Definitionen gilt jeweils

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \{...\} = \lim_{t \rightarrow -\infty} \{...\} . \quad (2.16)$$

Es bleibt zu fragen, ob die hier getroffene Definition eines relaxierenden Hamiltonschen Systems auch physikalisch sinnvoll ist. Ist die Forderung der Relaxation der Erwartungswerte aller Observablen nicht zu stark? Sollte man nicht im Sinn einer Subdynamik [54,39] nur die Relaxation der Erwartungswerte makroskopischer Observablen fordern? Mathematisch läßt sich diese Verallgemeinerung natürlich leicht durchführen. Ein Studium der Abschnitte 5 und 6 zeigt aber, daß damit physikalisch nichts gewonnen wird. Unsere Einteilung in schwach relaxierende und nur im zeitlichen Mittel relaxierende Hamiltonsche Systeme ist schon fein genug.

2.3 Gebundene Zustände und Streuzustände

Unter einem gebundenen Zustand versteht man intuitiv einen Zustand, der im Laufe der Zeit sich nur in einem beschränkten Bereich des Phasenraums bewegt. Analog versteht man unter einem Streuzustand einen Zustand, der für große Zeiten im Unendlichen verschwindet. Wir präzisieren dies zu

Definition 2.4. Sei (Γ, μ, T_t) ein Hamiltonsches System. Ein Zustand $\rho \in \mathcal{K}$ heißt ein gebundener Zustand, wenn für fast alle

$x \in \Gamma$ mit $\rho(x) \neq 0$ die Phasenbahn $\{T_t x | t \in \mathbb{R}\}$ beschränkt ist. Ein Zustand $\rho \in \mathcal{K}$ heißt ein Streuzustand, wenn für fast alle $x \in \Gamma$ mit $\rho(x) \neq 0$ die Phasenbahn $\{T_t x | t \in \mathbb{R}\}$ unbeschränkt ist.

In Abschnitt M3 beweisen wir den folgenden Satz:

Satz 2.5. Sei (Γ, μ, T_t) ein Hamiltonsches System mit Liouville-operator L . Sei $\{\Delta_j \subset \Gamma | j \in I\}$ eine Familie von meßbaren und invarianten Mengen mit der Eigenschaft, daß das Punktspektrum von $L|_{\mathcal{L}^2(\Delta_j, d\mu)}$ die Null enthält und daß das Punktspektrum von $L|_{\mathcal{L}^2(\Gamma \setminus \Delta_j, d\mu)}$ die Null nicht enthält für alle $j \in I$, und sei $\tilde{\Gamma}_1$ die, bis auf eine Menge vom Maß Null eindeutig bestimmte, kleinste Menge aus $\{\Delta_j | j \in I\}$. Weiterhin sei $\mathcal{K}_1 = \mathcal{L}^2(\tilde{\Gamma}_1, d\mu)$ und $\mathcal{K}_2 = \mathcal{L}^2(\Gamma \setminus \tilde{\Gamma}_1, d\mu)$. (Es ist also $\mathcal{K} = \mathcal{K}_1 \oplus \mathcal{K}_2$.) Dann gilt:

- (i) Jeder Zustand $\rho \in \mathcal{K}_1$ ist ein gebundener Zustand.
- (ii) Jeder Zustand $\rho \in \mathcal{K}_2$ ist ein Streuzustand.
- (iii) Ist $\rho \in \mathcal{K}$ ein gebundener Zustand, dann ist $P_0 \rho$ ein gebundener Zustand.
- (iv) Ist $\rho \in \mathcal{K}$ ein Streuzustand, dann ist

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \rho \circ T_{-t} = 0. \quad (2.17)$$

Ist $\rho \in \mathcal{K}$ ein beliebiger Zustand, dann zerfällt er nach Satz 2.5 in eine orthogonale Summe aus einem Streuzustand und einem (im allgemeinen nicht normierten) gebundenen Zustand. Dies ist ganz analog zur Quantenmechanik. Der entscheidende Unterschied ist, daß der Unterraum $P_0 \mathcal{K}$ bereits die ganze Information über gebundene und gestreute Zustände enthält. Wie in der Quantenmechanik gibt es bei Systemen endlicher räumlicher Ausdehnung

nur gebundene Zustände.

Am Rande sei erwähnt, daß ganz analog zur Quantenmechanik eine klassische Streutheorie entwickelt worden ist [10,28,56]. Man definiert also die Møllerschen Wellenoperatoren, die Streumatrix und die asymptotischen Zustände. Diese existieren für die Streuung an einem festen Potential, falls dieses schneller als das Coulombpotential abfällt. (Eine überraschende Übereinstimmung mit der Quantenmechanik!)

2.4 Relaxation eines Hamiltonschen Systems und die spektralen Eigenschaften seines Liouvilleoperators

Den wichtigen Zusammenhang zwischen der Relaxation eines Hamiltonschen Systems und dem Spektrum seines Liouvilleoperators zeigt der in Abschnitt M2 bewiesene

Satz 2.6. Sei (Γ, μ, T_t) ein Hamiltonsches System mit Liouvilleoperator L . Dann gilt:

- (i) Ist das Spektrum von L bis auf die Null absolut stetig, dann ist das Hamiltonsche System (Γ, μ, T_t) relaxierend.
- (ii) Das Hamiltonsche System (Γ, μ, T_t) ist genau dann schwach relaxierend, wenn das Spektrum von L bis auf die Null stetig ist.

Satz 2.6 liefert den Schlüssel für die Untersuchung der Relaxation eines Hamiltonschen Systems: Kennt man das Spektrum seines Liouvilleoperators, dann folgt, ob das Hamiltonsche System relaxiert, bzw. schwach relaxiert. Insbesondere folgt aus (ii), daß das Hamiltonsche System genau dann schwach relaxiert, wenn das Punktspektrum seines Liouvilleoperators außer der Null keine weiteren Eigenwerte enthält.

2.5 Die präzisierte Fragestellung

Wir können jetzt die Fragestellung der Einleitung etwas genauer fassen: Für welche Hamiltonschen Systeme strebt ein beliebiger Anfangszustand für $t \rightarrow \infty$ im Sinn der schwachen Topologie gegen einen stationären Zustand? (Unter einem stationären Zustand wollen wir immer einen zeitunabhängigen Zustand verstehen. Ein Gleichgewichtszustand ist ein stationärer Zustand, der sich thermodynamisch interpretieren läßt, z.B. das kanonische Ensemble. Vgl. Abschnitt 7.3.) Nach Definition 2.1 ist dies offensichtlich äquivalent zu der Frage: Welche Hamiltonschen Systeme sind relaxierend?

Beides sind physikalische Fragestellungen. Die erste betont mehr die Vorstellung eines sich zeitlich entwickelnden Zustandes, die zweite das Relaxieren von Erwartungswerten.

Wenn wir den Limes $t \rightarrow \infty$ nicht über alle t -Werte laufen lassen, sondern eine (nur von dem vorgegebenen Hamiltonschen System abhängige) Menge der Dichte Null aussparen ⁺⁾ , dann fragen wir nur noch nach der Menge der schwach relaxierenden Hamiltonschen Systeme. Mit Satz 2.6(ii) ist dies äquivalent zu: Für welche Hamiltonschen Systeme hat der zugehörige Liouvilleoperator von Null verschiedene Eigenwerte? Dies ist die mathematische Fassung unserer Fragestellung.

2.6 Ein historischer Exkurs

Wir wollen versuchen, ein wenig die historische Entwicklung unserer Problemstellung nachzuzeichnen. Dies gibt uns gleichzeitig die Gelegenheit, die wichtigsten neueren Arbeiten auf

⁺⁾ Siehe S. 14

diesem Gebiet anzuführen.

In dem zwölften Kapitel seines Buches "Elementary Principles in Statistical Mechanics" (erschienen 1902) [18] untersucht J.W. Gibbs die Frage, "ob etwa eine Gesamtheit von isolierten Systemen im Laufe der Zeit eine Tendenz zu einem Zustande statistischen Gleichgewichtes besitzt" ^{*)}. Es ist Gibbs unmittelbar klar, daß wegen des Liouvilleschen Satzes die Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(t)$ für $t \rightarrow \infty$ nicht punktweise gegen eine stationäre Dichte streben kann. (Es sei betont, daß es sich hier immer um eine Dichte im Phasenraum und nicht auf einer Energiefläche handelt.) Um die Neuartigkeit des hier auftretenden Limes zu verstehen, greift Gibbs auf das Beispiel des Vermischens zweier inkompressibler Flüssigkeiten zurück.

"Wir wollen jedoch annehmen, daß der Farbstoff mit veränderlicher Dichtigkeit verteilt sei. Geben wir der Flüssigkeit eine beliebige Bewegung, die nur dem hydrodynamischen Gesetze der Inkompressibilität unterworfen ist - sei es nun eine stationäre Strömung, oder eine mit der Zeit veränderliche - so bleibt die Dichtigkeit des Farbstoffes in jedem bestimmten Punkte der Flüssigkeit ungeändert, und dasselbe gilt auch von dem durchschnittlichen Quadrate dieser Dichtigkeit. Und doch ist uns nichts bekannter als die Tatsache, daß das Umrühren die Tendenz hat, eine Flüssigkeit in den Zustand gleichförmiger Mischung, oder gleichförmiger Dichtigkeiten ihrer Bestandteile zu versetzen, ein Zustand, der durch die Minimalwerte der Durchschnittsquadrate dieser Dichtigkeiten charakterisiert wird." ⁺⁺⁾

Im Sinn dieses Beispiels geht Gibbs von dem "feinen" $\rho(t)$ zu dem über kleine Phasenzellen gemittelten "groben" $P(t)$ über und vermutet für dieses "grobe" $P(t)$ eine punktweise Konvergenz gegen eine stationäre Verteilung im Limes $t \rightarrow \infty$ ⁺⁺⁺⁾.

^{*)} S.146 ⁺⁺⁾ S.147

⁺⁺⁺⁾ Siehe nächste Seite.

H.A. Lorentz [43] vermutet noch zusätzlich, daß die Limesverteilung $\lim_{t \rightarrow \infty} P(t)$ nur von der Energie abhängt. P. und T. Ehrenfest [12] erkennen klar, daß dies eine zusätzliche Hypothese vom Typus der Ergodenhypothese ist.

In mathematischen Kreisen stößt die Gibbssche Verrührungshypothese auf eine gewisse Skepsis [61,71]. Erst die schöne Analyse von J. Kroò (1911) [36] beseitigen diese Zweifel. Kroò beweist, daß auf alle Systeme mit einem Freiheitsgrad (und beschränkten Phasenbahnen), mit Ausnahme des harmonischen, die Gibbssche Hypothese zutrifft.⁺ (Vgl. auch Poincaré [52].)

Durch die Entwicklung der mathematischen Ergodentheorie (1932) wird eine genaue Fassung der Gibbsschen Verrührungshypothese ermöglicht. In der Arbeit "Proof of Gibbs' Hypothesis on the Tendency toward Statistical Equilibrium" [26] führt

+++)) Funktionalanalytisch verstehen wir dies heute so: Aus der schwach konvergenten Folge $\rho(t)$, $t \rightarrow \infty$, wird durch Wirkung eines kompakten Operators K , nämlich eines Projektionsoperators mit endlich dimensionalem Wertebereich, eine stark konvergente Folge $P(t) = K \rho(t)$, $t \rightarrow \infty$.

+) Mit den Notationen der vorherigen Abschnitte läßt sich der Satz von Kroò so zusammenfassen: Sei $(\Gamma, dqdp, T_t)$ ein Hamiltonsches System mit Hamiltonfunktion H , nur gebundenen Zuständen und $T \subset \mathbb{R} \times \mathbb{R}$. Weiterhin sei $T(E)$ die Zeit eines geschlossenen Durchlaufs der Phasenbahn $\{(q,p) \in \Gamma \mid H(q,p) = E\}$. Dann gilt für jede stetig differenzierbare Funktion $\rho: \Gamma \rightarrow \mathbb{R}$ und jede offene Menge A

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int_A (\rho \circ T_{-t})(q,p) dqdp = \int_A (P_0 \rho)(q,p) dqdp, \quad ,$$

falls $\frac{dT(E)}{dE} = 0$ für nur endlich viele Werte von E .

Satz 5.5 zeigt, daß man (wie könnte es anders sein) 'stetig differenzierbar' bzw. 'offen' durch 'meßbar' und 'endlich viele' durch 'Menge vom Lebesguemaß Null' ersetzen darf.

E. Hopf die beiden Definitionen 2.1 und 2.2 unter dem Namen 'tendency toward stationarity' ein ^{*)}. Die naheliegende physikalische Interpretation dieser Definitionen und ihr enger Zusammenhang mit der Gibbsschen Hypothese scheint der Gemeinschaft der Physiker allerdings entgangen zu sein. Zumindestens wird in dem bekannten Übersichtsartikel von ter Haar (1957) [21] (oder auch in dem Buch von Jancel [30]) die Hopfsche Arbeit zwar im Rahmen der Ergodentheorie näher diskutiert, die Gibbssche Verrührungshypothese aber unabhängig davon in ihrer ursprünglichen Form (mit feiner und grober Verteilung) referiert ⁺⁺⁾.

Auch auf der mathematischen Seite sind die Hopfschen Gedanken in dieser Form nicht weitergeführt worden. Dies hatte allerdings seinen guten Grund. Schon von Neumann [47] zeigt, daß bei einer Gruppe maßerhaltender Transformationen, die nicht ergodisch ist, sich unter geeigneten Voraussetzungen eine Zerlegung in ergodische Bestandteile durchführen läßt (vgl. auch Abschnitt 4.2). Diese Resultate sind später noch sehr verallgemeinert worden [29]. Mathematisch gesehen kann man sich also zunächst einmal auf die Untersuchung der einfachsten Klasse von Gruppen maßerhaltender Transformationen beschränken, nämlich der ergodischen Transformationen, bei denen die beiden einzigen invarianten Mengen (bis auf eine Menge vom Maß Null) der ganze Raum und die Nullmenge sind. In dem Hopfschen Buch über Ergoden-

^{*)} Der Titel der Arbeit ist irreführend. In ihr werden nämlich eine Reihe äquivalenter Formulierungen von (2.13) und (2.14) bewiesen und nicht, wie man erwarten würde, gezeigt, daß eine gewisse Klasse mechanischer Systeme diese Eigenschaft besitzen. Zu dieser Fragestellung wird nur das Ergebnis von Kroö zitiert.

⁺⁺⁾ Ein Grund hierfür mag sein, daß man bis zu dieser Zeit fast ausschließlich Tendenz gegen das Gleichgewicht mit der Existenz eines (verallgemeinerten) H-Theorems gleichsetzte. Dieses versucht man dann, in der "groben" Form für $H(t) = \int_{\Gamma} p(t) \ln p(t) d\mu$ herzuleiten.

theorie [27] wird dann auch konsequenterweise die Tendenz gegen eine stationäre Verteilung nur noch für ergodische Systeme als Mischungstypus im engeren und weiteren Sinn definiert.

Die Gibbssche Verrührungshypothese in der Hopfschen Form ist in der Physik bei der Beschäftigung mit speziellen Systemen "wiederentdeckt" worden. Die Arbeit von Frisch [16] über die Dynamik eines eindimensionalen Gases harter Scheiben mit periodischen Randbedingungen enthält, unserem Wissen nach das erste Mal in der physikalischen Literatur, eine klare Diskussion über die Annäherung an das Gleichgewicht im Sinn der Konvergenz der Erwartungswerte von "lokalen Observablen", also im Sinn eines schwachen Limes. Noch ausführlicher sind die Untersuchungen von Hobson und Loomis über das gleiche System aber mit ideal reflektierenden Randbedingungen. Beide weisen unter anderem nach, daß diese Systeme relaxieren. Oft qualitativ oder mit sehr speziellen Phasenfunktionen werden Systeme von einem Freiheitsgrad im Gibbsschen Sinn von Born [7], Brillouin [8] und Synge [65], allerdings im Hinblick auf recht unterschiedliche Fragestellungen, diskutiert. Grad [20] und Hobson [23] halten die schwache Konvergenz von $\rho(t)$ für $t \rightarrow \infty$ zwar für plausibel, betonen aber das jegliche Fehlen eines mathematischen Beweises. Für den Fall eines Teilchens in einem Zentralkräftefeld ist die schwache Konvergenz inzwischen von Prosser [55] gezeigt worden unter der Voraussetzung, daß das Potential analytisch ist und seine dritte Ableitung nicht verschwindet.

Die von uns hier durchgeführte Untersuchung sollte natürlich nicht als ganz unabhängig von der allgemeinen Theorie der dynamischen Systeme und der klassischen Mechanik [32] gesehen werden. Ihrer Wichtigkeit wegen seien deswegen zwei neuere Ent-

wicklungen genannt, die auch ausführlicher in den Übersichtsartikeln von Wightman [68], Farquhar [14] und Lebowitz und Penrose [41] nachgelesen werden können.

Die von Kolmogoroff [32] eingeleitete Rückbesinnung der Ergodentheorie auf ihren mechanischen Ursprung hat für die Physik zwei besonders wichtige Resultate ergeben. Das Theorem von Kolmogoroff, Arnold und Moser [33,2,45] ^{*)} untersucht die Störung eines separierbaren Hamiltonschen Systems ⁺⁺⁾ mit dem überraschenden Resultat, daß bei genügend kleinen Störungen immer noch N Konstanten der Bewegung existieren. Die Arbeiten von Sinai ⁺⁺⁺⁾ zeigen, daß das Hartekugelgas mit mehr als einem Teilchen in einem vollkommen elastisch reflektierenden Kasten auf jeder Fläche konstanter Energie ein K-System, also insbesondere mischend und ergodisch ist. Dies ist das erste physikalisch einigermaßen realistische System, bei dem die Eigenschaften nachgewiesen sind, die man allgemein von Systemen der statistischen Mechanik erwartet: Die Energie ist die einzige Konstante der Bewegung. Das System zeigt ein Streben zum Gleichgewicht und hat starke stochastische Eigenschaften.

Zum anderen hat durch die Entwicklung großer Rechenanlagen die "experimentelle Seite" große Fortschritte gemacht. Es ist heute möglich, die Bewegungsgleichungen eines Systems von etwa 4000 harten Kugeln [69] oder eines Systems von etwa 1000 Teilchen

^{*)} Dieses Theorem wurde von Kolmogoroff behauptet und später unabhängig von Arnold und Moser bewiesen.

⁺⁺⁾ Siehe Abschnitt 5.2.

⁺⁺⁺⁾ Der vollständige (ungewöhnlich lange [3,S.76]) Beweis ist noch nicht veröffentlicht (der Folklore nach nur in einem südrussischen Dialekt). Eine große Arbeit soll erscheinen. Die Behauptung und eine Skizze des Beweises findet sich in [62,63].

mit Lennard-Jones Wechselwirkung [57,67] numerisch zu integrieren. Viele Fragen, die einer theoretischen Behandlung bisher unzugänglich waren, können jetzt mikroskopisch untersucht werden (etwa Fragen zur kinetischen Gastheorie durch Wood [69] und zu dem stochastischen Verhalten dynamischer Systeme durch Ford [15]).

3. Ein Seitenblick auf die Quantenmechanik

Ein quantenmechanisches System $\mathcal{S}$ ist durch einen selbstadjungierten Hamiltonoperator H in einem separablen Hilbertraum $\mathcal{H}$, bzw. durch die von ihm erzeugte unitäre Gruppe $U(t) = e^{iHt}$ charakterisiert.

Es ist ziemlich klar, wie die Definitionen 2.1 bis 2.3 auf den quantenmechanischen Fall zu übertragen sind. Der klassische Erwartungswert $\langle f \rangle_p(t) = \langle p(t) | f \rangle$ muß jeweils durch den quantenmechanischen Erwartungswert

$$\langle A \rangle_W(t) = \text{tr}(AU(t)WU(t)^*) \quad (3.1)$$

ersetzt werden. Der selbstadjungierte Operator A repräsentiert dabei die betrachtete Observable und der statistische Operator W den Zustand des Systems zur Zeit $t = 0$. Aus technischen Gründen (vgl. Satz und Vermutung M1.2) schränken wir die Observablenklasse auf Hilbert-Schmidt-Operatoren ein. Nicht notwendig, aber mathematisch angenehm ist es dann, für A und W beliebige Hilbert-Schmidt-Operatoren zuzulassen. Versehen wir die Menge der Hilbert-Schmidt-Operatoren $\mathcal{T}_2$ mit dem Skalarprodukt $\text{tr}(V^*W)$, so ergibt sich als Analogon zu dem Operator P_0 im klassischen Fall die orthogonale Projektion $\mathcal{P}_0$ auf den Unterraum aller unter $U(t) \cdot U(t)^*$ invarianten Hilbert-Schmidt-Operatoren. Es ist also $\mathcal{P}_0 \mathcal{T}_2 = \{W \in \mathcal{T}_2 \mid U(t)WU(t)^* = W \text{ für alle } t \in \mathbb{R}\}$. Wir erhalten somit die

Definition 3.1. Sei $U(t)$ die unitäre Gruppe eines quantenmechanischen Systems $\mathcal{S}$.

(i) Gilt für alle $V, W \in \mathcal{T}_2$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \operatorname{tr}(V^* U(t) W U(t)^*) = \operatorname{tr}(V^* \mathcal{P}_0 W) , \quad (3.2)$$

dann heißt $\mathcal{J}$ relaxierend.

(ii) Gilt für alle $V, W \in \mathcal{T}_2$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t |\operatorname{tr}(V^* U(s) W U(s)^*) - \operatorname{tr}(V^* \mathcal{P}_0 W)|^2 ds = 0 , \quad (3.3)$$

dann heißt $\mathcal{J}$ schwach relaxierend.

(iii) Gilt für alle $V, W \in \mathcal{T}_2$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t \operatorname{tr}(V^* U(s) W U(s)^*) ds = \operatorname{tr}(V^* \mathcal{P}_0 W) , \quad (3.4)$$

dann heißt $\mathcal{J}$ im zeitlichen Mittel relaxierend.

3.2 Relaxation eines quantenmechanischen Systems und die spektralen Eigenschaften seines Hamiltonoperators

Ganz analog zum klassischen Fall gilt der folgende Satz ⁺⁾ :

Satz 3.2. Sei H der Hamiltonoperator eines quantenmechanischen Systems $\mathcal{J}$. Dann gilt:

- (i) Ist das Spektrum von H bis auf einen Eigenwert absolut stetig, dann ist $\mathcal{J}$ relaxierend.
- (ii) $\mathcal{J}$ ist genau dann schwach relaxierend, wenn das Spektrum von H bis auf einen Eigenwert stetig ist.
- (iii) $\mathcal{J}$ relaxiert im zeitlichen Mittel.

⁺⁾ Siehe Abschnitt M1.

In der Quantenmechanik sind die statistischen Operatoren auf dem bezüglich des Hamiltonoperators H absolut stetigen Unter-
raum von $\mathcal{K}$ Streuzustände. Satz 3.2 zeigt also, daß in der Quan-
tenmechanik nur Erwartungswerte zu Streuzuständen relaxieren.
Erwartungswerte zu gebundenen Zuständen sind immer fastperiodisch
in der Zeit. Dies ist ein entscheidender Unterschied zur klassi-
schen statistischen Mechanik, in der auch Erwartungswerte zu ge-
gebenen Zuständen relaxieren können.

3.3 Diskussion

Endliche Systeme der statistischen Mechanik sind immer
räumlich beschränkt. Es gibt in diesem Fall nur gebundene Zu-
stände. Der Hamiltonoperator eines solchen Systems hat also ein
reines Punktspektrum. Jeder Erwartungswert ist fastperiodisch in
der Zeit. Dies zeigt auch, daß eine Abschwächung von Definition
3.1 auf nur einige (makroskopische) Observable das fastperiodi-
sche Verhalten nicht aufhebt. In der Quantenmechanik relaxieren
räumlich beschränkte Systeme nicht.

Diese Tatsache ist nun nicht etwa ein Mangel der Quanten-
mechanik, sondern eher ein Mangel unserer mathematischen Defini-
tion. Es ist ja bekannt, daß fastperiodische Funktionen, wenn die
Frequenzen der periodischen Teile nicht zu regelmäßig liegen, über
lange Zeiten hinweg exponentiell abfallen können. In diesem Sinne
sollten wir also in der Quantenmechanik einen schwächeren Relaxa-
tionsbegriff einführen: etwa Relaxation nur für bestimmte Zeit-
intervalle. Mathematisch wird dies allerdings recht kompliziert.

Die hier vorliegende Situation gleicht unserer Meinung
nach der Situation bei der Definition von Phasenübergängen. Man
beobachtet Phasenübergänge natürlich schon bei Systemen mit end-

lich vielen Teilchen. In Computereperimenten zeigt das Hartekugelgas sogar schon bei 6^4 Teilchen einen Phasenübergang. Das Gibbssche Potential (freie Enthalpie) hat einen deutlichen Knick [69]. Theoretisch definiert man als Phasenübergang all die Punkte des Zustandsraums, für die das Gibbssche Potential nicht analytisch ist. Für endliche Systeme ist das mit Hilfe der statistischen Mechanik berechnete Gibbssche Potential immer analytisch. Erst im thermodynamischen Limes, also in der Idealisierung eines unendlich großen Systems, können sich Unstetigkeiten der Ableitungen des Gibbsschen Potentials ergeben.

Da unsere rechnerischen Fähigkeiten nicht sehr groß sind, wünscht man sich eine mathematisch einfache Definition. (Könnten wir die Zustandssumme vieler Systeme für endliche Teilchenzahl berechnen, so könnte man natürlich auf die obige Definition eines Phasenüberganges verzichten.) Wir bezahlen allerdings dafür mit einer physikalischen Idealisierung.

Halten wir nun an der mathematisch einfachen Definition der Relaxation von Erwartungswerten beliebiger Observabler fest, so ergeben sich für die Quantenmechanik zwei Idealisierungsmöglichkeiten. Bei fester Teilchenzahl kann man zum klassischen Grenzfall übergehen. Will man die quantenmechanische Struktur der Theorie erhalten, so muß man zu einem unendlich großen System übergehen. (Heuristisch erreicht man dies durch immer dichter liegende Eigenwerte des Hamiltonoperators, Ersetzung der Summen durch Integrale etc.. Eine strenge Untersuchung wird durch den C^* -Algebra Ansatz versucht.) Bei beiden Idealisierungen erwartet man ein relaxierendes Verhalten. Für den klassischen Grenzfall wird dies in der vorliegenden Arbeit für eine gewisse Klasse von Systemen auch streng bewiesen.

4. Ein Vergleich mit der Ergodentheorie

4.1 Abstrakte dynamische Systeme

In der Ergodentheorie untersucht man abstrakte dynamische Systeme [3]. Dies ist ein Tripel $(M, \mathfrak{A}, \phi_t)$ bestehend aus einem Maßraum $(M, \mathfrak{A}, \nu)$ mit endlichem Maß ν , $\nu(M) = 1$, und einer einparametrischen Gruppe ϕ_t von maßerhaltenden Transformationen von M auf M . Die Gruppe ϕ_t soll $\mathfrak{A} \times \mathbb{R}$ -meßbar^{*)} sein.

Wir führen den Hilbertraum $\mathfrak{H} = L^2(M, d\nu)$ ein. Dann wird durch

$$f \circ \phi_t = U(t)f \quad (4.1)$$

für alle $f \in \mathfrak{H}$ eine einparametrische, stark stetige unitäre Gruppe $U(t)$ auf $\mathfrak{H}$ induziert.

Definition 4.1. Sei $(M, \mathfrak{A}, \phi_t)$ ein abstraktes dynamisches System, $U(t)$ die nach (4.1) induzierte unitäre Gruppe und 1 die konstante Funktion auf M .

(i) Gilt für alle $f, g \in \mathfrak{H}$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t \langle g | U(s)f \rangle ds = \langle g | 1 \rangle \langle 1 | f \rangle, \quad (4.2)$$

dann heißt $(M, \mathfrak{A}, \phi_t)$ ergodisch.

(ii) Gilt für alle $f, g \in \mathfrak{H}$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t |\langle g | U(s)f \rangle - \langle g | 1 \rangle \langle 1 | f \rangle|^2 ds = 0, \quad (4.3)$$

^{*)} $\mathfrak{L}(\cdot)$ sind die Borelmengen.

dann heißt (M, ν, ϕ_t) schwach mischend.

(iii) Gilt für alle $f, g \in \mathcal{X}$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle g | U(t)f \rangle = \langle g | 1 \rangle \langle 1 | f \rangle, \quad (4.4)$$

dann heißt (M, ν, ϕ_t) mischend.

(Die üblichen Definitionen sind den hier gegebenen Definitionen äquivalent.)

Ein Vergleich mit den Definitionen 2.1 bis 2.3 zeigt die folgende Analogie:

ergodisch	$\leadsto$	im zeitlichen Mittel relaxierend
schwach mischend	$\leadsto$	schwach relaxierend
mischend	$\leadsto$	relaxierend

Für ein Hamiltonsches System sind die jeweiligen Begriffe genau dann äquivalent, wenn der Unterraum $P_0 \mathcal{X}$ nur die konstanten Funktionen enthält.

4.2 Zerlegung eines Hamiltonschen Systems in ergodische Komponenten

Bei einem Hamiltonschen System (Γ, μ, T_t) ist entweder $P_0 \mathcal{X} = \{0\}$ oder $\dim(P_0 \mathcal{X}) = \infty$ (Satz M6.2(i)). Hamiltonsche Systeme sind also nicht ergodisch.

Um nun trotzdem die Begriffe der Ergodentheorie auf Hamiltonsche Systeme anwenden zu können, müssen wir den Phasenraum in geeigneter Weise in invariante Mengen $\Delta(j) \subset \bar{\Gamma}$, $j \in I$, zerlegen und auf diesen invariante Maße $\nu(j)$, $j \in I$, so definieren, daß $(\Delta(j), \nu(j), T_t)$ ergodisch ist. Kryloff und Bogoliouboff [37] haben gezeigt, daß in dem Fall einer Gruppe stetiger Trans-

formationen auf einem kompakten metrischen Raum eine solche Zerlegung immer möglich ist. Wir können diese Sätze offensichtlich dann anwenden, wenn es gelingt, den Phasenraum Γ in kompakte invariante Mengen zu zerlegen. Nach Lemma M3.2 und M3.3 können wir die Zerlegung also nur für die invariante Menge $\Gamma_1 \subset \Gamma$ aller beschränkten Phasenbahnen durchführen ⁺).

Es sei also (Γ, μ, T_t) ein Hamiltonsches System mit nur gebundenen Zuständen. Dann existiert nach Lemma M3.3 eine Zerlegung des Phasenraumes Γ in abzählbar viele kompakte invariante Mengen Δ_k , $k \in I_1 \subset \mathbb{N}$. Sei $\Delta \in \{\Delta_k | k \in I_1\}$ und $\mathfrak{R}$ die Menge der regulären ⁺⁺⁾ Punkte von Δ . Für alle $x \in \mathfrak{R}$ und für alle Borelmengen $B \in \mathfrak{B}(\Delta)$ ist durch

$$m_x(B) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t \delta_{T_{-s}x}(B) ds \quad (4.5)$$

ein Maß auf $(\Delta, \mathfrak{B}(\Delta))$ definiert ⁺⁺⁺⁾. (Δ, m_x, T_t) ist ergodisch. Wir zerlegen die Menge $\{m_x | x \in \mathfrak{R}\}$ der ergodischen Maße in Teilmengen $\mathfrak{v}(j)$ untereinander gleicher Maße. Dies definiert die Mengen

$$\Delta(j) = \{x \in \mathfrak{R} | m_x \in \mathfrak{v}(j)\} \quad (4.6)$$

$\Delta(j)$ ist der Träger von $\mathfrak{v}(j)$.

Nach Jacobs [29] existiert eine $\mathfrak{B}(\Delta)$ -meßbare Funktion von $\mathfrak{R}$ in das Intervall $[0,1]$, die auf jeder Menge $\Delta(j)$ konstant

⁺) Bei einer geeigneten Verallgemeinerung des Ergodizitätsbegriffes läßt sich auch die invariante Menge $\Gamma_2 \subset \Gamma$ aller unbeschränkten Phasenbahnen in analoger Weise zerlegen. Die Komponenten haben dann aber immer ein unendliches Maß.

⁺⁺⁾ Siehe Anhang 1d).

⁺⁺⁺⁾ δ_x ist das Maß mit der Einheitsmasse im Punkt x .

ist und auf verschiedenen Mengen verschiedene Werte annimmt. Die Äquivalenzklassen von ergodischen Maßen $\nu(j)$ sind also mit Zahlen aus $[0,1]$ indizierbar.

Führt man diese Zerlegung für alle Δ_k , $k \in I_1 \subset \mathbb{N}$, durch, so erhält man die Äquivalenzklassen von ergodischen Maßen $\nu(j)$, $j \in I \subset [0, \infty[$, mit Trägern $\Delta(j)$. $(\Delta(j), \nu(j), T_t)$, $j \in I \subset [0, \infty[$, heißen die ergodischen Komponenten des Hamiltonschen Systems (Γ, μ, T_t) . Sie sind eindeutig bestimmt. Es gilt:

$$(i) \quad \Delta(j) \cap \Delta(j') = \emptyset \quad \text{für } j \neq j' \quad (4.7)$$

$$(ii) \quad T_t \Delta(j) = \Delta(j) \quad \text{für alle } j \in I \quad (4.8)$$

$$(iii) \quad \bigcup_{j \in I} \Delta(j) = \Gamma \quad \mu\text{-f.ü.} \quad (4.9)$$

$$(iv) \quad (\Gamma, \nu(j), T_t), \text{ äquivalent dazu } (\Delta(j), \nu(j), T_t), \text{ ist ergo-} \\ \text{disch für alle } j \in I.$$

In der statistischen Mechanik sind die ergodischen Komponenten wohl bekannt für den Fall, daß die Hamiltonfunktion H des Hamiltonschen Systems (Γ, μ, T_t) die einzige Konstante der Bewegung ist. Das heißt, für jede meßbare Funktion $f: \Gamma \rightarrow \mathbb{C}$ mit

$$f \circ T_t = f \quad \text{f.ü.} \quad \text{folgt, daß} \quad f = g \circ H \quad \text{f.ü.} \quad (4.10)$$

mit einer geeigneten meßbaren Funktion $g: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$. Es ist dann für fast alle $j \in I$ $\Delta(j)$ die Energiefläche $\{x \in \Gamma \mid H(x) = c(j)\}$ und $\nu(j)$ das mikrokanonische Ensemble

$$\nu(j) = \delta(H - c(j)) / \int_{\Gamma} \delta(H - c(j)) d\mu \quad (4.11)$$

"Fast alle" soll heißen, daß die Vereinigung der Träger $\Delta(j)$, die keine Energiefläche sind, eine Menge vom μ -Maße Null bilden (Anhang 2).

Existieren mehrere funktional unabhängige Konstanten der Bewegung (sinnvollerweise differenzierbare wegen des Satzes von Jacobs, s.o.), so ergeben sich analog die verallgemeinerten oder pantamikrokanonischen Ensembles [42,66] ^{*)}.

4.3 Die Hierarchie der Begriffe des 'Strebens zum Gleichgewicht'

Sei (Γ, μ, T_t) ein Hamiltonsches System mit nur gebundenen Zuständen und $(\Delta(j), \nu(j), T_t)$, $j \in I$, seine ergodischen Komponenten. Sind μ -fast alle Komponenten mischend bzw. schwach mischend, dann ist (Γ, μ, T_t) relaxierend bzw. schwach relaxierend. Die Umkehrung gilt allerdings nicht. Es gibt Beispiele für Hamiltonsche Systeme, bei denen jede ergodische Komponente nur ergodisch ist, aber das Hamiltonsche System trotzdem relaxierend ist (Abschnitt M5.4). Dies rührt anschaulich gesehen daher, daß die einzelnen ergodischen Komponenten sozusagen verschiedene Umlauffrequenzen (von $T_t x_0$, $t \in \mathbb{R}$) besitzen, deren Überlagerung so inkohärent ist, daß das Hamiltonsche System relaxiert.

Die Eigenschaft des Mischens μ -fast aller ergodischen Komponenten ist also stärker als die Eigenschaft der Relaxation. Für das Streben zum Gleichgewicht eines Hamiltonschen Systems (Γ, μ, T_t) erhalten wir somit die folgende Hierarchie jeweils stärkerer Begriffe.

^{*)} Die Korrespondenz zwischen pantamikrokanonischen Ensembles und ergodischen Komponenten ist nicht ein-eindeutig. Wohl in Unkenntnis der Arbeit von Kryloff und Bogoliouboff verwendet Lewis [42] eine ganz andere Ableitung.

- (1) μ -fast alle Komponenten von (Γ, μ, T_t) sind
ein Bernoulli-System . ⁺⁾
↓
- (2) ein K-System . ⁺⁾
↓
- (3) mischend .
↓
- (4) (Γ, μ, T_t) ist relaxierend.
↓
- (5) (Γ, μ, T_t) ist schwach relaxierend.

Jeden einzelnen dieser Begriffe können wir noch verschärfen durch

- (A) Die Hamiltonfunktion H von (Γ, μ, T_t) ist die einzige Konstante der Bewegung.

Nach Sinai [62,63] ist das Hartekugelgas mit mehr als einem Teilchen ein Beispiel für (2) zusammen mit (A). Die in Satz 5.5 charakterisierten Hamiltonschen Systeme sind Beispiele für (4) und zwar zusammen mit (A) für $N = 1$ und ohne (A) für $N > 1$.

Es ist physikalisch eine offene Frage, welche der oben angeführten Eigenschaften dazu ausreichen (wenn überhaupt), etwa die bekannten Transportgleichungen aus der Liouvillegleichung abzuleiten. Mathematisch ist zu vermuten, daß die Eigenschaft (5) ohne die Bedingung (A) noch am ehesten für eine große Klasse von Hamiltonschen Systemen nachgewiesen werden kann ⁺⁺⁾.

(In Klammern sei bemerkt, daß in allen uns bekannten Arbei-

⁺⁾ Bernoulli-Systeme und K-Systeme haben starke stochastische Eigenschaften in dem Sinne, daß aufeinanderfolgende Beobachtungen unkorreliert sind. Für die genauen Definitionen siehe [3].

⁺⁺⁾ Vgl. Abschnitt 5.1.

ten über Anwendungen der Ergodentheorie auf Systeme der klassischen Mechanik die Begriffe ergodisch, mischend etc. aus historischen Gründen immer in dem Sinn von ergodisch, mischend etc. auf einer Fläche konstanter Energie verstanden werden. Ein System ist dann nicht ergodisch, wenn es außer der Energie noch weitere (funktional unabhängige) Konstanten der Bewegung gibt, also wenn Bedingung (A) verletzt ist. Für das Studium des Strebens zum Gleichgewicht hoffen wir überzeugend gezeigt zu haben, daß es sinnvoll ist, (A) als eine zusätzliche, von den Eigenschaften (1) bis (5) unabhängige Bedingung einzuführen. Die Bedingung (A) beinhaltet nämlich nur eine Aussage über die "Größe" von $P_0 \mathcal{X}$: (A) ist äquivalent zu

$$P_0 \mathcal{X} = \{g \cdot H | g: R \rightarrow C \text{ meßbar, } \int_R |g|^2 dH(\mu) < \infty^+ \}.)$$

4.4 Das Problem eines vollständigen Satzes von Invarianten

Zwei abstrakte dynamische Systeme (M, ν, ϕ_t) und (M', ν', ϕ'_t) heißen isomorph, wenn eine fast überall bijektive, meßbare und maßerhaltende Funktion $f: M \rightarrow M'$ existiert, derart daß für alle $t \in R$

$$f \circ \phi_t \circ f^{-1} = \phi'_t \quad \nu' - f.ü. \quad . \quad (4.12)$$

Eine Invariante ist eine Eigenschaft des abstrakten dynamischen Systems, die bei beliebigen Isomorphismen erhalten bleibt. So sind etwa die spektralen Eigenschaften des erzeugenden Operators der von ϕ_t induzierten unitären Gruppe Invarianten, die

⁺) $H(\mu)$ ist das Bildmaß von μ bezüglich H .

spektralen Invarianten.^{+)).}

Der Satz der spektralen Invarianten ist aber nicht vollständig. Es gibt abstrakte dynamische Systeme, deren induzierten unitären Gruppen unitär äquivalent sind, die aber nicht isomorph sind. Eine weitere Invariante ist zum Beispiel die von Kolmogoroff eingeführte Entropie eines abstrakten dynamischen Systems [3]. Bis heute ist es nicht gelungen, einen vollständigen Satz von Invarianten anzugeben.

Es ist zu erwarten, daß bei Hamiltonschen Systemen ein ähnlicher Sachverhalt vorliegt. Wir definieren daher:

Zwei Hamiltonsche Systeme (Γ, μ, T_t) und (Γ', μ, T'_t) heißen isomorph, wenn eine kanonische Transformation $T: \Gamma \rightarrow \Gamma'$ existiert, derart daß für alle $t \in \mathbb{R}$

$$T^{-1} \circ T'_t \circ T = T_t \quad (4.13)$$

auf Γ . Sind H und H' die zugehörigen Hamiltonfunktionen, so ist dies äquivalent zu

$$H' \circ T = H \quad (4.14)$$

Sind (Γ, μ, T_t) und (Γ', μ, T'_t) isomorph, dann sind die zugehörigen Liouvilleoperatoren unitär äquivalent. Wie bei abstrakten dynamischen Systemen gilt die Umkehrung nicht. Es gibt Beispiele für Hamiltonsche Systeme mit unitär äquivalenten Liouvilleoperatoren, die nicht isomorph sind (Abschnitt M5.2). Die

⁺⁾ Dies sind die verschiedenen Anteile des Spektrums samt Entartung, genauer die disjunkten Äquivalenzklassen von Spektralmaßen einheitlicher Vielfachheit [58].

Einteilung von Hamiltonschen Systemen nach spektralen Eigenschaften der zugehörigen Liouvilleoperatoren ist also gröber als die Einteilung in Äquivalenzklassen isomorpher Systeme.

Zur physikalischen Interpretation betrachten wir die beiden induzierten unitären Gruppen $U(t)$ und $U'(t)$. Sie seien unitär äquivalent bezüglich U . Zudem sei $\Gamma = \Gamma'$, also $\mathcal{X} = \mathcal{X}'$. Dann gilt für alle $f, g \in \mathcal{X}$

$$\langle g | U(t) f \rangle = \langle g | U^{-1} U'(t) U f \rangle = \langle U g | U'(t) U f \rangle . \quad (4.15)$$

Ist g und Ug ein Zustand, dann heißt dies folgendes: Zur Observablen f und dem Zustand g des ungestrichenen Systems zur Zeit $t = 0$ existieren eine neue Observable Uf und ein neuer Zustand Ug des gestrichenen Systems, so daß das zeitliche Verhalten der Erwartungswerte beider Observablen gleich ist:

$$\langle f \rangle_g(t) = \langle Uf \rangle_{Ug}(t) . \quad (4.16)$$

Physikalisch lassen sich die beiden Systeme allerdings unterscheiden, da der Erwartungswert einer festen Observablen bei einem bestimmten Anfangszustand ein für beide Systeme verschiedenes zeitliches Verhalten hat.

5. Das Spektrum von Liouvilleoperatoren

5.1 Eine Vermutung

Definition 5.1. Sei (Γ, μ, T_t) ein Hamiltonsches System mit Hamiltonfunktion H . Es existiere eine abgeschlossene invariante Menge

$\Delta \subset \bar{\Gamma}$ mit $\mu(\Delta) \neq 0$ und eine kanonische Transformation

$T: \Delta \rightarrow \Omega$, derart daß

$$H \circ T^{-1}: \{q, p\} \mapsto \frac{1}{2}(p_1^2 + \lambda^2 q_1^2) + \bar{H}(q_2, \dots, q_N, p_2, \dots, p_N) \quad (5.1)$$

auf Ω , $\lambda \neq 0$. Dann heißt die Hamiltonfunktion H lokal harmonisch.

Ist die Hamiltonfunktion H nicht lokal harmonisch, so heißt sie anharmonisch.

Vermutung 5.2. Sei (Γ, μ, T_t) ein Hamiltonsches System mit Hamiltonfunktion H und Liouvilleoperator L . Ist H anharmonisch, dann ist (Γ, μ, T_t) schwach relaxierend.

Oder äquivalent dazu:

Hat L einen von Null verschiedenen Eigenwert, dann ist H lokal harmonisch.

Lokal harmonisch bedeutet anschaulich, daß ein Quasiteilchen existiert, das in einem Freiheitsgrad sich unabhängig von den übrigen Bewegungen rein harmonisch mit der Frequenz λ bewegt. Nennen wir dies einen harmonischen Anteil, dann ergibt sich folgendes Bild.⁺⁾ Zunächst zerfällt der Phasenraum Γ in abzählbar viele disjunkte invariante Mengen $\Delta_k \subset \bar{\Gamma}$, $k \in I \subset \mathbb{N}$, mit $\mu(\Delta_k) \neq 0$. Auf jeder Menge Δ_k existieren gewisse harmoni-

⁺⁾ Dies läßt sich mit Hilfe von Vermutung 5.2 beweisen.

sche Anteile (entweder gar kein harmonischer Anteil oder höchstens N Anteile) mit den Frequenzen $\lambda_1^k, \dots, \lambda_M^k$, $0 \leq M \leq N$. Die Frequenzen sind rational unabhängig. Das Punktspektrum von L eingeschränkt auf $\mathcal{L}^2(\Delta_k, d\mu)$ ist dann eine beliebige Kombination der Grundfrequenzen:

$$\sigma_{pp}(L| \mathcal{L}^2(\Delta_k, d\mu)) = \{ \vec{n} \cdot \vec{\lambda}^k \mid \vec{n} \in \mathbb{Z}^M \} \quad (5.2)$$

Das gesamte Punktspektrum ist einfach die Vereinigung

$$\sigma_{pp}(L) = \bigcup_{k \in I} \sigma_{pp}(L| \mathcal{L}^2(\Delta_k, d\mu)) \quad (5.3)$$

Es gilt also

Folgerung 5.3. Sei (Γ, μ, T_t) ein Hamiltonsches System mit Liouvilleoperator L . Dann ist das Punktspektrum von L die Vereinigung von abzählbar vielen freien additiven Gruppen mit $\text{Rang} \leq N^+$.

In Abschnitt M4 beweisen wir die Vermutung 5.2 für die Teilklasse der separierbaren Hamiltonschen Systeme und in Abschnitt M6 eine schwache Version der Folgerung 5.3. Dies zeigt die Plausibilität der Vermutung. Das Studium der separierbaren Hamiltonschen Systeme zeigt außerdem, daß in der Klasse der Hamiltonschen Systeme der Anteil solcher mit lokal harmonischer Hamiltonfunktion intuitiv gesehen verschwindend klein ist. Die entscheidende Aussage unserer Vermutung ist also, daß praktisch alle Liouvilleoperatoren ein bis auf die Null stetiges Spektrum haben, d.h. praktisch alle Hamiltonschen Systeme schwach relaxieren.

⁺) Für die Definition siehe Anhang 1e).

5.2 Separierbare Hamiltonsche Systeme

Sei (Γ, μ, T_t) ein Hamiltonsches System mit Hamiltonfunktion H . Ersetzen wir p_k durch $\frac{\partial W}{\partial q_k}$, so ergibt sich die Hamilton-Jacobische partielle Differentialgleichung

$$H(q_1, \dots, q_N, \frac{\partial W}{\partial q_1}, \dots, \frac{\partial W}{\partial q_N}) = \alpha_1 \quad (5.4)$$

Sie heißt separierbar (manchmal auch integrierbar), wenn für ein geeignetes Koordinatensystem $q'_1, \dots, q'_N$ sich für sie ein vollständiges Integral der folgenden Form angeben läßt

$$W(q'_1, \dots, q'_N, \alpha_0, \dots, \alpha_N) = \sum_{k=1}^N W_k(q'_k, \alpha_1, \dots, \alpha_N) + \alpha_0 \quad (5.5)$$

(Die Separierbarkeit hängt entscheidend von der Wahl des Koordinatensystems ab.) Es lassen sich dann Wirkungsvariable und Winkelvariable mit den bekannten Eigenschaften einführen. Die kanonisch transformierte Hamiltonfunktion hängt nur von den Wirkungsvariablen ab [48,17].

In Anlehnung an diesen Sprachgebrauch definieren wir

Definition 5.4. T^N sei der N -dimensionale Torus. Ein Hamiltonsches System (Γ, μ, T_t) mit Hamiltonfunktion $\tilde{H}$ heißt separierbar, wenn eine offene Teilmenge $\Omega \subset \mathbb{R}^N$ und eine kanonische Transformation S existieren, so daß $S\Gamma = \Omega \cdot T^N$ und $\tilde{H} \circ S^{-1}$ nur von $J \in \Omega$ abhängt. $(\Omega \cdot T^N, \mu_N^* \mu_N, S \cdot T_t \circ S^{-1})$ ^{*)} heißt das transformierte

^{*)} μ_N ist das N -dimensionale Lebesguemaß.

System von (Γ, μ, T_t) und $H = \tilde{H} \circ S^{-1}$ heißt die transformierte Hamiltonfunktion.

Für die Klasse der separierbaren Hamiltonschen Systeme läßt sich das Spektrum der zugehörigen Liouvilleoperatoren vollständig charakterisieren (Abschnitt M4). Die wichtigsten Ergebnisse sind

Satz 5.5. Sei (Γ, μ, T_t) ein separierbares Hamiltonsches System mit Liouvilleoperator L und sei $(\Omega \times T^N, \mu_N \times \mu_N, S \circ T_t \circ S^{-1})$ das zugehörige transformierte System mit Hamiltonfunktion $H: \Omega \times T^N \rightarrow \mathbb{R}$. Gilt für alle $\vec{n} \in \mathbb{Z}^N \setminus \{0\}$

$$\text{grad}(\vec{n} \cdot \text{grad } H) \neq 0 \quad \mu_N\text{-f.ä.} \quad (5.6)$$

auf Ω^{+} , dann ist das Spektrum von L bis auf den Eigenwert Null absolut stetig.

Korollar 5.6. (Γ, μ, T_t) ist relaxierend.

Die Bedingung (5.6) besagt im wesentlichen, daß H in keiner der Variablen $J_1, \dots, J_N$ linear ist. Ein linearer Anteil von H läßt sich immer kanonisch in einen harmonischen Anteil transformieren. Wir sehen also, daß für separierbare Systeme Vermutung 5.2 bewiesen ist. Dies zeigt auch der folgende Satz über das Punktspektrum von L .

Satz 5.7. Sei (Γ, μ, T_t) ein separierbares Hamiltonsches System mit Liouvilleoperator L . Dann ist das Punktspektrum von L die

⁺⁾
$$\text{grad } H = \left\{ \frac{\partial H}{\partial J_1}, \dots, \frac{\partial H}{\partial J_N} \right\}.$$

Vereinigung von abzählbar vielen freien additiven Gruppen mit $\text{Rang} \leq N$. Jeder Eigenwert von L ist unendlichfach entartet.

Aus der Sicht der klassischen Mechanik ist die Klasse der separierbaren Hamiltonschen Systeme sehr umfangreich. Sie enthält nämlich alle Systeme mit einem Freiheitsgrad, das System eines Teilchens unter Einfluß einer beliebigen Zentral- oder Zweizentrenkraft, die harmonische Kette, das System N nichtwechselwirkender Teilchen in einem äußeren Feld und in gewissem Sinn jedes mechanische System, dessen Bewegungsgleichungen vollständig gelöst sind. Vom Standpunkt der statistischen Mechanik sind die separierbaren Systeme allerdings nicht sehr typisch, da sie immer so viele Konstanten der Bewegung wie Freiheitsgrade besitzen. Es ist aber die Hoffnung, daß ein gutes Verständnis der spektralen Eigenschaften von Liouvilleoperatoren zu separierbaren Hamiltonschen Systemen die Grundlage für die Untersuchung des Spektrums beliebiger Liouvilleoperatoren bildet.

5.3 Der allgemeine Fall

Im allgemeinen Fall sind die Ergebnisse leider etwas magerer. Bis jetzt läßt sich hier nur das Punktspektrum bis zu einem gewissen Grade charakterisieren.

Satz 5.8. Sei (Γ, μ, T_t) ein Hamiltonsches System mit Liouvilleoperator L . Dann ist das Punktspektrum von L die Vereinigung von abzählbar vielen additiven Gruppen. Jeder Eigenwert ist unendlichfach entartet.

Um die vermutete Folgerung 5.3 zu beweisen, fehlt also

noch, daß die eben erwähnten Gruppen frei sind und einen Rang $\leq N$ haben. Beschränken wir uns auf Eigenwerte zu stetigen Eigenfunktionen, so läßt sich wenigstens für diesen Fall Folgerung 5.3 mit der Abschätzung $\text{Rang} \leq 2N$ beweisen. Dies ähnelt der Situation bei ergodischen Systemen auf differenzierbaren Mannigfaltigkeiten [4].

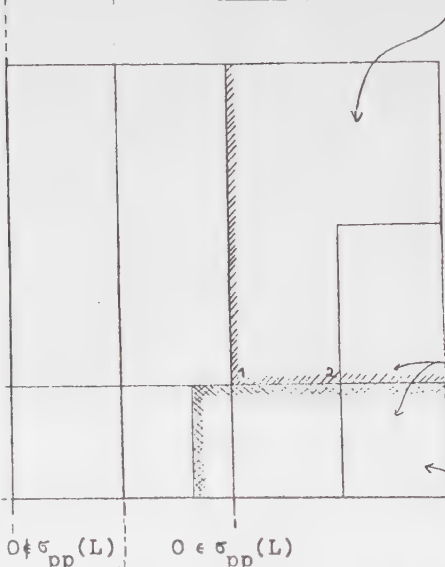
Zum Abschluß wollen wir noch die wesentlichsten Ergebnisse über die spektralen Eigenschaften von Liouvilleoperatoren in einer graphischen Übersicht knapp darstellen. Dabei soll das äußere Quadrat die Menge aller Liouvilleoperatoren repräsentieren. Die Tatsache, daß zwischen der von Punkt 1 nach Punkt 2 durchgezogenen Linie und der schräg schraffierten (///) Menge keine Punkte liegen, ist der Inhalt von Vermutung 5.2.

$$\sigma_{pp}(L) = \emptyset$$

Korollar M6.2

Bei zu diesen Liouvilleoperatoren
gehörigen Hamiltonschen Systemen strebt
jeder Zustand schwach gegen einen
stationären Zustand für $t \rightarrow \infty$.
Satz M2.1(ii) und Abschnitt 2

Menge der Liouvilleoperatoren
zu lokal harmonischen Hamiltonfunktionen
Definition 5.1



Menge der Liouvilleoperatoren zu separierbaren Hamiltonschen Systemen
Definition 5.4

$\sigma_{pp}(L) \neq \{0\}$
Vermutung 5.2
Satz M4.4

$0 \notin \sigma_{pp}(L)$

$0 \in \sigma_{pp}(L)$

$$\mu(\tilde{\Gamma}_1) \neq 0 \quad \tilde{\Gamma}_1 = \Gamma \text{ f.ü.}$$

$$\mu(\Gamma \setminus \tilde{\Gamma}_1) \neq 0$$

nur Streuzustände

nur gebundene Zustände

Streuzustände + gebundene Zustände

Satz 2.5

6. Hamiltonsche Systeme der klassischen statistischen Mechanik

Für viele Fälle der statistischen Mechanik genügt es, nur Paarwechselwirkung zu betrachten. Eine charakteristische Hamiltonfunktion ist dann ^{*)}

$$H(q, p) = \sum_{j=1}^{3N} \frac{1}{2m} p_j^2 + W(q_j) + \sum_{k=1}^{N-1} V(|q_{3k+1} - q_{3l+1}, q_{3k+2} - q_{3l+2}, q_{3k+3} - q_{3l+3}|) \quad (6.1)$$

$\{q_{3k+1}, q_{3k+2}, q_{3k+3}\} \in \mathbb{R}^3$ fassen wir als Koordinaten des $(k+1)$ -ten Teilchens auf. $W: [0, a] \rightarrow \mathbb{R}$ ist das Wandpotential. Es gilt also

$$W \geq 0 \quad \text{und} \quad W(y) \rightarrow \infty \quad \text{für} \quad y \rightarrow 0, y \rightarrow a \quad (6.2)$$

V ist das Wechselwirkungspotential. Es wird im allgemeinen einen harten Kern besitzen, d.h.

$$V(r) \rightarrow \infty \quad \text{für} \quad r \rightarrow b_+, \quad b > 0, \quad (6.3)$$

und für große Argumentwerte gegen Null gehen. Der Phasenraum eines Systems mit Hamiltonfunktion (6.1) ist dann

$$\Gamma = ([0, a] \times \mathbb{R})^{3N} \setminus S_b \quad (6.4)$$

mit

^{*)} Wir beschränken uns hier auf den Fall gleicher Teilchen mit zentraler Paarwechselwirkung. Eine Verallgemeinerung folgt unmittelbar.

$$S_b = \{q \in \mathbb{R}^{3N} \mid |q_{3k+1} - q_{3l+1}, q_{3k+2} - q_{3l+2}, q_{3k+3} - q_{3l+3}| < b \text{ für } k \neq l\}. \quad (6.5)$$

Damit (6.1) die Hamiltonfunktion eines Hamiltonschen Systems ist, müssen die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen

$$\frac{d}{dt} x(t) = [x, H], \quad x = \{q, p\} \in \Gamma \quad (6.6)$$

für jede Anfangsbedingung $x_0 \in \Gamma$ eine globale Lösung besitzen ($-\infty < t < \infty$). Dazu muß H gewisse Lipschitzbedingungen erfüllen. Hinreichend sind etwa [28]:

- (a) W und V sind von unten beschränkt.
- (b) W und V sind zweimal stetig differenzierbar mit beschränkten Ableitungen auf $\{x \in \Gamma \mid H(x) < E\}$ für jedes $E < \infty$.

Ein System mit Hamiltonfunktion (6.1) hat nur gebundene Zustände, da jede Fläche konstanter Energie kompakt ist (vgl. Satz 2.5).

Es sei nun (Γ, μ, T_t) ein Hamiltonsches System mit Hamiltonfunktion der Form (6.1). Unter welchen Voraussetzungen an W und V ist (Γ, μ, T_t) relaxierend?

Es sei zunächst $V = 0$. Nach Satz 5.5 ist (Γ, μ, T_t) relaxierend, wenn W anharmonisch, d.h. nicht proportional zu y^2 ist. Nehmen wir $W = 0$ auf $[t, a - \epsilon]$, $\epsilon < \frac{a}{2}$, an, dann ist

$$\frac{d^3 W}{dy^3} \neq 0 \text{ f.ü.} \quad (6.7)$$

auf $[0, \epsilon] \cup [a - \epsilon, a]$ eine hinreichende Bedingung dafür, daß (Γ, μ, T_t) relaxierend ist. Physikalisch gesehen ist dies eine

sehr schwache Bedingung, da bei realen Wandpotentialen keine streng linearen Kräfte auftreten.

Ist W anharmonisch und $V \neq 0$, so erwartet man, daß sich die Relaxationseigenschaften des Systems nicht ändern. Die Wechselwirkung der Teilchen sollte das Gleichgewicht eher noch schneller herbeiführen.

Vermutung 6.1. Sei (Γ, μ, T_t) ein Hamiltonsches System mit Hamiltonfunktion der Form (6.1). Ist W anharmonisch, dann relaxiert (Γ, μ, T_t) .

Ein Beweis der Vermutung 6.1 fehlt bis jetzt.

Wir sind also von dem Nachweis, daß typische Systeme der klassischen statistischen Mechanik relaxieren, noch ein gutes Stück entfernt. Nur für den Fall nichtwechselwirkender Teilchen ("ideales Gas") ist die Relaxation streng gezeigt.

Zu Beweisversuchen von Vermutung 6.1 wollen wir hier noch vor einer (mathematischen) Sackgasse warnen. Es liegt nahe, das Potential V als Störung zu dem "freien" Problem aufzufassen. Es ist dann

$$H = H_0 + V \text{ und } L = L_0 + L_V \text{ mit } L_V = i[V, \cdot] \quad . \quad (6.8)$$

Formale Störungsentwicklungen dieser Art sind zahlreich durchgeführt und in der kinetischen Gastheorie auch durchaus mit Erfolg angewandt worden [53,60,11].

Mathematisch gesehen handelt es sich hier um Störungstheorie im kontinuierlichen Spektrum. Da das Spektrum von L_0 bis auf die Null absolut stetig ist, sind die Voraussetzungen

der Störungstheorie erfüllt. Es ist also sinnvoll, nach der Existenz der verallgemeinerten Wellenoperatoren (Kato [31])

$$W_{\pm} = s\text{-}\lim_{t \rightarrow \pm \infty} e^{iLt} e^{-iL_0 t} (1 - P_0^0) \quad (6.9)$$

zu fragen ⁺⁾ . Man überzeugt sich nun aber, daß die verallgemeinerten Wellenoperatoren außer in dem trivialen Fall $V = 0$ nicht existieren. Die bei quantenmechanischen und klassischen Streuproblemen so erfolgreich anwendbare Störungstheorie versagt also im Fall der klassischen statistischen Mechanik. Anschaulich ist dieses Versagen leicht zu verstehen. Bei Streuproblemen "fühlt" ein Teilchen die Störung nur für eine begrenzte Zeit. In unserem Fall hingegen fühlt es die noch so schwache Störung über alle Zeiten hinweg.

⁺⁾ P_0^0 ist die Projektion auf den Eigenraum zum Eigenwert Null von L_0 .

7. Anwendung auf einfache Systeme der statistischen Mechanik

7.1 Isothermer Druckausgleich beim idealen Gas

Wir betrachten ein Gas von N nicht wechselwirkenden Teilchen der Masse m , das in einem kubischen Kasten der Länge a eingeschlossen ist. Die Hamiltonfunktion des Systems sei durch (6.1) mit $V = 0$ gegeben. Das Gas sei bei konstanter Temperatur inhomogen verteilt. Zur Zeit $t = 0$ sei also die Teilchendichte nicht konstant.

Wir zerlegen das Intervall $I = [0, a]$ in $I = \bigcup_{k=1}^M I_k$. In der Zelle $I_k \times I_1 \times I_m$ seien $N(k, l, m)$ Teilchen:

$$\sum_{k, l, m=1}^M N(k, l, m) = N \quad (7.1)$$

In der (k, l, m) -Zelle herrsche zur Zeit $t = 0$ thermisches Gleichgewicht mit der Temperatur $T = 1/k\beta$. $H(k, l, m)$ sei die Hamiltonfunktion der Teilchen in der (k, l, m) -Zelle. Dann ist der Zustand dieser Teilchen zur Zeit $t = 0$ das kanonische Ensemble

$$\rho_{klm}(0) = \frac{1}{Z(k, l, m)} e^{-\beta H(k, l, m)} \zeta_{klm} \quad (7.2)$$

auf $(I \times R)^{3N(k, l, m)}$ mit

$$\zeta_{klm} = \begin{cases} 1 & \text{auf } (I_k \times I_1 \times I_m, R)^{3N(k, l, m)} \\ 0 & \text{auf } (I \times R)^{3N(k, l, m)} \setminus (I_k \times I_1 \times I_m, R)^{3N(k, l, m)} \end{cases} \quad (7.3)$$

$Z(k, l, m)$ ist eine Normierungskonstante. Der Zustand des Systems zur Zeit $t = 0$ ist dann

$$\rho(0) = \prod_{k,l,m=1}^M \rho_{klm}(0) = \frac{1}{Z} e^{-\beta H} \prod_{j=1}^{3N} \zeta_j \quad (7.4)$$

Dabei ist der Normierungsfaktor

$$Z = \int_{\Gamma} e^{-\beta H} \prod_{j=1}^{3N} \zeta_j d^{3N}q d^{3N}p \quad (7.5)$$

und

$$\zeta_j = \begin{cases} 1 & \text{auf } I_k, \text{ falls Teilchen mit der Koordinate } q_j \text{ in } I_k \\ 0 & \text{auf } I \setminus I_k \end{cases} \quad (7.6)$$

Ist W anharmonisch, dann existiert nach Satz 5.5

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \rho(t) = P_0 \rho(0) \quad (7.7)$$

Es ist (vgl. Anhang 3)

$$P_0 \rho(0) = \frac{1}{Z} e^{-\beta H} f(H_1, \dots, H_{3N}) \quad \text{f.ü.} \quad (7.8)$$

mit $H_j(q_j, p_j) = (1/2m)p_j^2 + W(q_j)$. Im allgemeinen ist also der sich für $t \rightarrow \infty$ ergebende stationäre Zustand keine kanonische Verteilung. Dies ist erst näherungsweise der Fall, wenn die Reichweite des Potentials klein gegenüber der Kastendimension ist.

Um dies zu zeigen, nehmen wir an, daß

$$W(y) = 0 \quad \text{auf} \quad [\varepsilon, a - \varepsilon] \quad , \quad \varepsilon < \frac{a}{2} \quad (7.9)$$

Dann gilt die Abschätzung (Anhang 3)

$$\prod_{k,l,m=1}^M \left[\left(\frac{d(I_k) - 2\epsilon}{a} \right) \left(\frac{d(I_l) - 2\epsilon}{a} \right) \left(\frac{d(I_m) - 2\epsilon}{a} \right) \right]^{N(k,l,m)} \quad (7.10)$$

$$\leq f(H_1, \dots, H_{3N}) \leq \prod_{k,l,m=1}^M \left[\left(\frac{d(I_k) + 2\epsilon}{a} \right) \left(\frac{d(I_l) + 2\epsilon}{a} \right) \left(\frac{d(I_m) + 2\epsilon}{a} \right) \right]^{N(k,l,m)}$$

f.ü. auf $([\epsilon, a - \epsilon] \times \mathbb{R})^{3N}$, wobei $d(I_k)$ die Länge des Intervalls I_k ist. Für $\epsilon/a \rightarrow 0$ gilt

$$f(H_1, \dots, H_{3N}) \rightarrow \text{const.} \quad (7.11)$$

und

$$P_0 \rho(0) \rightarrow \frac{1}{Z^1} e^{-\Delta H} \quad (7.12)$$

(Man darf natürlich nicht zur Grenze übergehen, da dann W nicht mehr differenzierbar ist.)

Bei kleiner relativen Reichweite des Wandpotentials ergibt sich also für $t \rightarrow \infty$ ein kanonisches Ensemble der Temperatur $T = 1/k\beta$. Die Teilchendichte ist dann konstant, alle Druckunterschiede sind ausgeglichen.

7.2 Druck- und Temperatúrausgleich beim idealen Gas

Wir betrachten wiederum ein Gas mit N Teilchen, das in einem kubischen Kasten der Länge a eingeschlossen ist. Die Hamiltonfunktion des Systems sei durch (6.1) gegeben. Um die Rechnung einigermaßen einfach zu gestalten, müssen wir eine Reihe weiterer Annahmen machen. Eine explizite Fehlerabschätzung wie in 7.1 scheint recht kompliziert zu sein. Zunächst sei die Reichweite von W klein gegenüber a . Weiterhin sei V eine Wechselwir-

kung, die so klein ist, daß sie einen verschwindenden Beitrag zur Zustandssumme liefert, aber alle Freiheitsgrade so miteinander koppelt, daß H die einzige Konstante der Bewegung des Systems ist

Wie in 7.1 teilen wir den Kasten in (k,l,m) -Zellen ein. Der Zustand der Teilchen in der (k,l,m) -Zelle zur Zeit $t = 0$ sei durch ein mikrokanonisches Ensemble der Gesamtenergie $E(k,l,m)$ gegeben. Der Zustand des Systems zur Zeit $t = 0$ ist dann

$$\rho(0) = \frac{1}{Z} \prod_{k,l,m=1}^M \delta(H(k,l,m) - E(k,l,m)) \chi_{klm} \quad (7.13)$$

Dabei ist $H(k,l,m)$ die Hamiltonfunktion der Teilchen in der (k,l,m) -Zelle und χ_{klm} wie in (7.3).

Ist W anharmonisch, dann gilt

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \rho(t) = P_0 \rho(0) \quad (7.14)$$

Nach Anhang 3 gilt

$$P_0 \rho(0) = \frac{1}{Z} \delta(H - \sum_{k,l,m=1}^M E(k,l,m)) \quad (7.15)$$

(Dies ist im Distributionssinne zu verstehen:

$$\int_{\Gamma} (P_0 f) \rho(0) d\mu = \frac{1}{Z} \int_{\Gamma} f \delta(H - \sum_{k,l,m=1}^M E(k,l,m)) d\mu$$

für alle Testfunktionen $f \in C_0(\Gamma)$.)

Für $t \rightarrow \infty$ gleichen sich also nach (7.15) alle Temperatur- und Druckunterschiede in dem idealen Gas aus.

7.3 Das Problem der thermodynamischen Interpretation stationärer Zustände

Sei (Γ, μ, T_t) ein relaxierendes Hamiltonsches System ohne Streuzustände. Dann gilt für jeden Zustand $\rho \in \mathcal{X}$

$$w\text{-}\lim_{t \rightarrow \infty} \rho \circ T_{-t} = P_0 \rho . \quad (7.16)$$

Nach (2.12) und Satz 2.5 wissen wir, daß $P_0 \rho$ ein stationärer Zustand ist. Bei beliebigen Anfangszuständen ρ ergeben sich für $t \rightarrow \infty$ natürlich beliebige stationäre Zustände $P_0 \rho$. Aber selbst bei physikalisch realistischen Anfangszuständen, wie etwa in 7.1, ist $P_0 \rho$ im allgemeinen weder das mikrokanonische noch das kanonische Ensemble. (Wir betrachten nur festes N.) Nur für diese beiden Ensemble existiert aber eine thermodynamische Interpretation, das heißt, nur bei diesen beiden Ensembles können wir den dort auftretenden Parametern thermodynamische Größen wie innere Energie, Temperatur etc. zuordnen. Ist zum Beispiel

$$P_0 \rho = \frac{1}{Z} e^{-\alpha H^2} , \quad (7.17)$$

dann wissen wir nicht, wie α mit thermodynamischen Größen zusammenhängt. Dieses Problem der thermodynamischen Interpretation stationärer Zustände scheint bisher vollkommen ungelöst zu sein.

Für unsere Zwecke wäre eine Untersuchung dieses Problems natürlich recht wünschenswert. Wir könnten dann entscheiden, unter welchen Bedingungen der sich für $t \rightarrow \infty$ analytisch ergebende Zustand $P_0 \rho$ etwa einem kanonischen Ensemble mit fester

Temperatur thermodynamisch äquivalent ist.

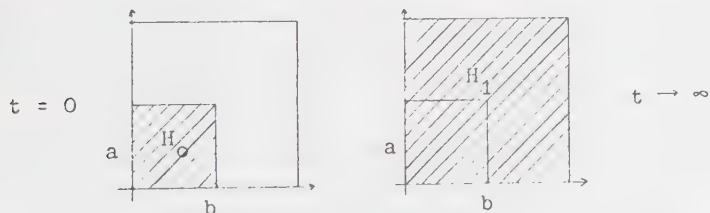
Es ist zu vermuten, daß zur Lösung dieses Problems der thermodynamische Limes eines stationären Zustandes untersucht werden muß. In dieser Grenze sollten sich dann die auftretenden Parameter thermodynamisch sinnvoll interpretieren lassen ⁺).

⁺) Ein Hinweis in dieser Richtung ist das Ergebnis von Ruelle [59]: Sei $\chi_{[a,E]}$ die charakteristische Funktion des Intervalls $[a,E]$. Ruelle zeigt, daß unter gewissen Voraussetzungen die Ensembles $\chi_{[a,E]} \circ H$ für alle $a < E$ im thermodynamischen Limes die gleiche Entropiefunktion $s(\rho, \varepsilon)$ haben.

8. Zum Problem der Irreversibilität

Es existiert eine umfangreiche Literatur, in der das Problem der Irreversibilität von den verschiedensten Aspekten her untersucht wird. Zu dieser allgemeinen Diskussion wollen wir hier nicht beitragen. Statt dessen beschränken wir uns auf eine einfache Modellsituation ^{*)}: das Gay-Lussacsche (oder auch Joulesche) Expansionsexperiment mit einem idealen Gas. Wir zeigen, daß in diesem Fall die Zunahme der Entropie, wie sie von dem zweiten Hauptsatz der Thermodynamik gefordert wird, direkt aus der Dynamik des Systems (und natürlich den üblichen Annahmen der statistischen Mechanik) folgt. In diesem Zusammenhang ist es von Interesse, den Umkehrreinwand von Loschmidt (1876) [44] und den Wiederkehrreinwand von Zermelo (1896) [70] zu diskutieren. Historisch gesehen richteten sich beide Einwände gegen das Boltzmannsche H-Theorem und führten mit dazu, dessen statistischen Charakter zu erhellen. Obwohl hier kein H-Theorem abgeleitet wird, halten wir eine Behandlung der beiden Einwände trotzdem für recht instruktiv.

Wie in 7.1 sei ein ideales Gas vorgegeben, das in einem kubischen Kasten der Länge a eingeschlossen sei. Dieser Kasten befinde sich in einem zweiten der Länge $b > a$.



^{*)} Man vergleiche dies mit einer Arbeit von Zwanzig [72], in der in ähnlichem Sinne die Brownsche Bewegung eines Teilchens in einem "Bad" von harmonischen Oszillatoren diskutiert wird.

Zur Zeit $t = 0$ befinde sich das System (bezüglich der Hamiltonfunktion H_0) im thermischen Gleichgewicht. Es sei also

$$\rho(0) = \frac{1}{Z} e^{-\beta H_0} \quad (8.1)$$

Zur Zeit $t = 0$ wird die Wand des ersten Kastens zerstört. Die dynamische Entwicklung des Systems wird nun durch die neue Hamiltonfunktion H_1 beschrieben. Bezüglich H_1 ist $\rho(0)$ kein stationärer Zustand. Das Gas strömt aus. Für $t \rightarrow \infty$ stellt sich der neue Gleichgewichtszustand ^{*)}

$$P_0 \rho(0) = \frac{1}{Z'} e^{-\beta H_1} \quad (8.2)$$

ein.

8.1 Entropiezunahme

In Anhang 4 beweisen wir

Satz 8.1. Sei (Γ, μ, T_t) ein Hamiltonsches System mit nur gebundenen Zuständen. Dann gilt für alle Zustände $\rho \in \mathcal{X}$

$$-\int_{\Gamma} \rho \ln \rho \, d\mu \leq -\int_{\Gamma} (P_0 \rho) \ln (P_0 \rho) \, d\mu \quad , \quad (8.3)$$

falls beide Seiten existieren. Sind beide Seiten endlich, dann gilt die Gleichheit genau dann, wenn $P_0 \rho = \rho$.

(8.1) ist ein kanonisches Ensemble. Nach Gibbs ist seine Entropie

^{*)} Vgl. Abschnitt 7.1.

$$S_0 = -k \int_{\mathcal{X}} \rho(0) \ln \rho(0) d\mu \quad . \quad (8.4)$$

Ebenso ist die Gleichgewichtsentropie von (8.2)

$$S_{\infty} = -k \int_{\mathcal{X}} (P_0 \rho(0)) \ln(P_0 \rho(0)) d\mu \quad . \quad (8.5)$$

Mit Satz 8.1 folgt also die Entropiezunahme

$$S_0 < S_{\infty} \quad ^+) \quad . \quad (8.6)$$

Dies scheint der bekannten Tatsache zu widersprechen, daß (8.4) zeitlich konstant ist. Es gilt aber

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int_{\mathcal{X}} (\rho \cdot T_{-t}) \ln(\rho \cdot T_{-t}) d\mu = \int_{\mathcal{X}} \rho \ln \rho d\mu + \int_{\mathcal{X}} (P_0 \rho) \ln(P_0 \rho) d\mu \quad , \quad (8.7)$$

falls $P_0 \rho \neq \rho$ und beide Seiten endlich sind.

Wir stellen uns hier auf den Standpunkt, daß (1) ρ ein Erwartungswertfunktional ist und daß (2) (8.4) als Definition der Gleichgewichtsentropie nur auf Gleichgewichtszustände anwendbar ist. Nach (1) ist es dann sinnvoll zu sagen, daß das Funktional $\rho(t)$ (über $\mathcal{X}$) für Zeiten größer als die mittlere Relaxationszeit ungefähr gleich dem Funktional $P_0 \rho(0)$ ist. ('Ungefähr gleich' ist also im Sinn der schwachen Topologie und nicht etwa im Sinn der Topologie punktwieser Konvergenz gemeint.) Nach (2) ist dann die Entropie des neuen Gleichgewichtszustandes $P_0 \rho(0)$ über (8.5) und nicht über den Limes (8.7) definiert.

⁺) S_0 und S_{∞} stimmen zahlenmäßig mit der thermodynamischen Entropie überein.

8.2 Der Umkehrreinwand von Loschmidt

Die Mechanik ist invariant gegenüber Zeitumkehr:

$$t \mapsto -t, \quad q \mapsto q, \quad p \mapsto -p. \quad (8.8)$$

Betrachten wir einen Zustand $\rho(q,p,t)$, der sich dem Gleichgewicht nähert, dann sollte der durch Geschwindigkeitsumkehr entstehende Zustand $\rho(q,-p,t)$ sich vom Gleichgewicht entfernen. Dies scheint mit einem Streben zum Gleichgewicht beliebiger Anfangszustände nicht verträglich zu sein.

Um dies zu sehen, mögen sich bei dem Gay-Lussacschen Expansionsversuch zur Zeit $t_0 > t_{\text{rel}}^+$ die Geschwindigkeiten aller Teilchen umkehren ($p \mapsto -p$)⁺⁺. Damit gilt

$$\rho(q,p,t_0) \mapsto \rho'(q,p,t_0) = \rho(q,-p,t_0). \quad (8.9)$$

Zur Zeit $t = 2t_0$ ist dann

$$\rho'(q,p,2t_0) = \rho(q,-p,0) = \frac{1}{Z} e^{-\beta H_0(q,p)}. \quad (8.10)$$

Im Zeitintervall $[t_0, 2t_0]$ zeigt das System also ein "antithermodynamisches Verhalten" (Prigogine [53]). Es zieht sich wieder mit Wahrscheinlichkeit eins nach $[0, a]^3$ zusammen. Für $t > 2t_0$ haben wir das um $2t_0$ verschobene zeitliche Verhalten wie ohne die Geschwindigkeitsumkehr. Das Gas strebt gegen den Gleichge-

⁺) t_{rel} ist die mittlere Relaxationszeit.

⁺⁺) Wir behalten die positive Zeitrichtung bei. Ansonsten müsste man t durch $-t$ ersetzen und den Limes $t \rightarrow -\infty$ betrachten. Beides ist äquivalent.

wichtszustand

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \rho'(t) = P_0 \rho'(t_0) = P_0 \rho(0) \quad . \quad (8.11)$$

Unabhängig von der Größe von t_0 beobachtet man also eine große Fluktuation für die Zeitdauer von zwei mittleren Relaxationszeiten.

8.3 Der Wiederkehrreinwand von Zermelo

Der Wiederkehrreinwand basiert auf einem Theorem von Poincaré ⁺⁾ , das besagt, daß fast alle Phasenpunkte eines Hamiltonschen Systems mit kompakten Energieflächen wiederkehrend sind, d.h. sie kehren zu einem vorgegebenem Anfangspunkt beliebig nahe und unendlich oft zurück. Diese quasiperiodische Bewegung eines Phasenpunktes scheint mit einer Annäherung an das Gleichgewicht unvereinbar zu sein.

Da wir von vornherein Zustände als absolut stetige Wahrscheinlichkeitsmaße auf Γ definiert haben, tritt bei relaxierenden Hamiltonschen Systemen keine Wiederkehr der Zustände auf. Die Poincarésche Wiederkehr des Phasenpunktes äußert sich jetzt in Fluktuationen des Systems: Nach Poincaré gibt es eine (im allgemeinen sehr große) Zeit, zu der sich das Gas wieder ganz nach $[0, a]^3$ zusammenzieht. Im Ansatz der statistischen Mechanik gibt es eine zeitabhängige (für Zeiten größer als die mittlere Relaxationszeit im allgemeinen sehr kleine) Wahrscheinlichkeit, daß sich das Gas ganz in $[0, a]^3$ befindet.

Die statistische Mechanik beschreibt das mittlere zeitliche Verhalten eines Hamiltonschen Systems.

⁺⁾ Siehe Abschnitt M3.

Mathematischer Teil

M1. Das Spektrum von Hamiltonoperatoren und der Limes $t \rightarrow \infty$ quantenmechanischer Erwartungswerte

Sei H der Hamiltonoperator eines quantenmechanischen Systems $\mathcal{H}$ und $U(t) = e^{iHt}$ die von ihm erzeugte unitäre Gruppe auf $\mathcal{H}$, ein separabler Hilbertraum. Wir interessieren uns hier für den Limes $t \rightarrow \infty$ der Erwartungswerte

$$\text{tr}(AU(t)WU(t)^*) \quad . \quad (M1.1)$$

Dabei ist A ein beschränkter Operator und W ein Operator von Spurklasse ⁺⁾ . Für den Fall daß der Hamiltonoperator H ein rein diskretes Spektrum hat, ist diese Frage bereits von Ono [49], Bocchieri/Loinger [6], Golden/Longuet-Higgins [19] und Percival [51] untersucht worden. Für alle $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ und alle $W \in \mathcal{T}_1$ ist dann

$$t \mapsto \text{tr}(AU(t)WU(t)^*) \quad (M1.2)$$

eine fastperiodische Funktion. Insbesondere existiert also der Limes $t \rightarrow \infty$ nicht. Golden/Longuet-Higgins behandeln auch, allerdings mathematisch nicht allzu genau, den Fall eines rein stetigen Spektrums von H .

Satz M1.1 (Satz 3.2). Sei $\mathcal{T}_2$ die Menge aller Hilbert-Schmidt-Operatoren auf einem separablen Hilbertraum $\mathcal{H}$, versehen mit dem Skalarprodukt $\text{tr}(V^*W)$, und sei $U(t) = e^{iHt}$ eine stark stetige

⁺⁾ Wir bezeichnen die Menge der beschränkten Operatoren auf $\mathcal{H}$ mit $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ und die der Spurklasseoperatoren mit $\mathcal{T}_1 \subset \mathcal{L}(\mathcal{H})$.

unitäre Gruppe auf $\mathcal{X}$. Weiterhin sei $\mathcal{P}_0$ die Projektion auf den unter $U(t) \cdot U(t)^*$ invarianten Unterraum $\{W \in \mathcal{T}_2 \mid U(t)WU(t)^* = W\}$. Dann gilt:

(i) Ist das Spektrum von H bis auf einen Eigenwert absolut stetig, dann gilt für alle $V, W \in \mathcal{T}_2$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \operatorname{tr}(V^* U(t) W U(t)^*) = \operatorname{tr}(V^* \mathcal{P}_0 W) . \quad (\text{M1.3})$$

(ii) Das Spektrum von H ist genau dann bis auf einen Eigenwert stetig, wenn für alle $V, W \in \mathcal{T}_2$ gilt

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t |\operatorname{tr}(V^* U(s) W U(s)^*) - \operatorname{tr}(V^* \mathcal{P}_0 W)|^2 ds = 0 . \quad (\text{M1.4})$$

(iii) Für alle $V, W \in \mathcal{T}_2$ gilt

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t \operatorname{tr}(V^* U(s) W U(s)^*) ds = \operatorname{tr}(V^* \mathcal{P}_0 W) . \quad (\text{M1.5})$$

(iv) $\{P_k \mid k \in I\}$ sei die Menge der Projektionsoperatoren zu Eigenwerten von H . Dann ist

$$\mathcal{P}_0 W = \sum_{k \in I} P_k W P_k . \quad (\text{M1.6})$$

Beweis: ad(i): P sei der Projektionsoperator auf den Eigenraum des einzigen Eigenwertes von H . V und W seien von endlichem Rang $\leq N$. Dann ist mit $(\{\psi_k \mid k = 1, \dots, 2N\})$ ist eine Basis in der Vereinigung der Wertebereiche von V und W)

$$V = \sum_{i,j=1}^{2N} b_{ij} |\psi_i\rangle \langle \psi_j|, \quad W = \sum_{k,l=1}^{2N} c_{kl} |\psi_k\rangle \langle \psi_l| \quad (\text{M1.7})$$

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} \text{tr}(V^* U(t) W U(t)^*) &= \lim_{t \rightarrow \infty} \sum_{i,j,k,l=1}^{2N} \{ b_{ij}^* c_{kl} (\langle \psi_i | U(t) \psi_k \rangle \cdot \\ &\cdot \langle \psi_l | U(t)^* (1 - P) \psi_j \rangle + \langle \psi_l | U(t) (1 - P) \psi_k \rangle \langle \psi_i | U(t)^* P \psi_j \rangle) \} + \\ &+ \text{tr}(V^* P W P) \end{aligned} \quad (\text{M1.8})$$

Da das Spektrum von H auf $(1 - P)\mathbb{R}$ absolut stetig ist, gilt nach Satz M2.1

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle \psi_k | U(t) (1 - P) \psi_l \rangle = 0 \quad (\text{M1.9})$$

für alle $k, l = 1, \dots, 2N$. Da $\langle \psi | U(t) \psi \rangle$ beschränkt ist, gilt also (M1.3) für alle $V, W \in \mathcal{T}_2$ mit endlichem Rang ⁺).

Die Menge der Operatoren mit endlichem Rang liegt dicht in $\mathcal{T}_2$. W_n sei eine Folge von Operatoren mit endlichem Rang, die gegen $W \in \mathcal{T}_2$ konvergiert. Dann ist nach der Schwarzschen Ungleichung

$$\text{tr}((U(t) V U(t)^*)(W_n - W)) \leq \|V\|_2 \|W_n - W\|_2 \quad (\text{M1.10})$$

Also konvergiert $\text{tr}(V^* U(t) W_n U(t)^*)$ gleichmäßig gegen $\text{tr}(V^* U(t) W U(t)^*)$. (M1.3) gilt somit für alle $V \in \mathcal{T}_2$ von endlichem Rang und alle $W \in \mathcal{T}_2$.

Das gleiche Argument für V zeigt, daß (M1.3) für alle $V, W \in \mathcal{T}_2$ gilt.

ad (ii) und (iii): $W \mapsto U(t) W U(t)^*$ definiert eine stark steti

⁺) Wir zeigen unten, daß unter den gemachten Voraussetzungen $\mathcal{P}_0 W = P W P$.

unitäre Gruppe auf $\mathcal{T}_2$ mit erzeugendem Operator $[H, \cdot]^*$ auf $D([H, \cdot]) \subset \mathcal{T}_2$. Es sei $\sigma_{pp}(H) = \{\lambda_k | k \in I\}$. Wir zeigen nun, daß dann

$$\sigma_{pp}([H, \cdot]) = \{\lambda_j - \lambda_k | \lambda_j, \lambda_k \in \sigma_{pp}(H)\} . \quad (M1.11)$$

Damit folgt (M1.4) aus Satz M2.1(ii) und (M1.5) aus dem von Neumannschen Ergodensatz.

Sei $Hx_k = \lambda_k x_k$. Dann ist $|x_j\rangle\langle x_k|$ Eigenoperator zu $[H, \cdot]$ mit dem Eigenwert $\lambda_j - \lambda_k$.

Sei $\lambda \in \sigma_{pp}([H, \cdot])$. Dann existiert ein $W \in \mathcal{T}_2$, $W \neq 0$, mit

$$U(t)WU(t)^* = e^{i\lambda t}W \quad (M1.12)$$

für alle $t \in \mathbb{R}$. Damit folgt

$$U(t)WW^*U(t)^* = WW^* . \quad (M1.13)$$

Die spektrale Darstellung von WW^* sei

$$WW^* = \sum_{k \in I_1} a_k Q_k . \quad (M1.14)$$

Dann gilt

$$U(t)Q_k U(t)^* = Q_k \quad (M1.15)$$

für alle $k \in I_1$ und somit wird H von dem endlich dimensionalen Teilraum $Q_k \mathcal{H}$ reduziert. In $Q_k \mathcal{H}$ existiert also eine Basis

^{*)} $[H, A]$ ist hier der Kommutator, $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$.

ϕ_{kl} , $l \in I_2(k)$, von Eigenvektoren von H mit Eigenwerten λ_{kl} .

Da W kompakt ist, hat W die Normaldarstellung

$$W = \sum_{j \in I_3} c_j |\psi_j\rangle \langle \varphi_j| \quad (M1.16)$$

mit $c_j > 0$, $\langle \psi_j | \psi_k \rangle = \delta_{jk}$ und $\langle \varphi_j | \varphi_k \rangle = \delta_{jk}$. Dann ist

$$WW^* = \sum_{j \in I_3} c_j^2 |\psi_j\rangle \langle \psi_j| \quad (M1.17)$$

Der Vergleich mit (M1.14) zeigt $\psi_j \in Q_{k(j)}^\lambda$ und somit gilt

$$U(t) |\psi_j\rangle = \sum_{l \in I_2(k)} e^{i\lambda_{k(j)l}t} |\phi_{k(j)l}\rangle \langle \phi_{k(j)l} | \psi_j \rangle \quad (M1.18)$$

für alle $j \in I_3$. Die gleiche Überlegung für W^*W ergibt

$$U(t) |\varphi_j\rangle = \sum_{l' \in I_2'(k')} e^{i\lambda'_{k'(j)l'}t} |\phi'_{k'(j)l'}\rangle \langle \phi'_{k'(j)l'} | \varphi_j \rangle \quad (M1.19)$$

für alle $j \in I_3$. Setzt man (M1.18) und (M1.19) in (M1.16) und dieses in (M1.12) ein, so ergibt sich

$$\lambda = \lambda_{k(j)l} - \lambda'_{k'(j)l'} \quad (M1.20)$$

für alle $j \in I_3$, $l \in I_2(k)$ und $l' \in I_2'(k')$. Also hat $\lambda \in \sigma_{pp}([H, \cdot])$ die Form $\lambda_j - \lambda_k$ mit $\lambda_j, \lambda_k \in \sigma_{pp}(H)$.

ad(iv): Der Projektionsoperator auf den Eigenraum zum Eigenwert λ von $[H, \cdot]$ hat die Form $W \mapsto \sum_{\{j, k \in I \mid \lambda_j - \lambda_k = \lambda\}} P_j W P_k$. Damit ist

$$P_0 W = \sum_{k \in I} P_k W P_k.$$

Satz und Vermutung M1.2. Sei $U(t) = e^{iHt}$ eine stark stetige unitäre Gruppe auf dem separablen Hilbertraum $\mathcal{H}$, $E(\lambda)$ die Spektralschar von H , $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ die Menge der beschränkten Operatoren auf $\mathcal{H}$ und $\mathcal{T}_1$ die Menge der Spurklasseoperatoren auf $\mathcal{H}$. Jedem $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ sei durch

$$\langle \varphi | B_A \varphi \rangle = \int_{\{(\lambda, \nu) \in \mathbb{R}^2 | \lambda = \nu\}} d\langle \varphi | E(\lambda) A E(\nu) \varphi \rangle \quad (\text{M1.21})$$

der Operator $B_A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ zugeordnet. Dann ist $[A, B_A] = 0$ und $[H, B_A] = 0$ für alle $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ und es gilt:

(i) Ist das Spektrum von H bis auf einen Eigenwert absolut stetig, dann gilt für alle $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ und alle $W \in \mathcal{T}_1$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \text{tr}(AU(t)WU(t)^*) = \text{tr}(B_A W) \quad (\text{M1.22})$$

(ii) Das Spektrum von H ist genau dann bis auf einen Eigenwert stetig, wenn für alle $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ und alle $W \in \mathcal{T}_1$ gilt

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t |\text{tr}(AU(s)WU(s)^*) - \text{tr}(B_A W)|^2 ds = 0 \quad (\text{M1.23})$$

(iii) Für alle $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ und alle $W \in \mathcal{T}_1$ gilt

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t \text{tr}(AU(s)WU(s)^*) ds = \text{tr}(B_A W) \quad (\text{M1.24})$$

Bemerkung. 1.) Für $A \in \mathcal{T}_2$ ist Satz M1.2 ein Spezialfall von Satz

M1.1. Es ist dann $B_A = \sum_{k \in I} P_k A P_k$.

2.) Die Existenz der Limites (M1.22) und (M1.23) ist nur vermutet.

Falls die Limites existieren, folgt ihre angegebene Größe aus (iii).

3.) Enthält das Spektrum von H einen stetigen Anteil, dann ist

der Limes $\text{tr}(B_A W)$ im allgemeinen nicht in der Form $\text{tr}(AV)$ mit $V \in \mathcal{T}_1$ darstellbar. Vgl. dazu Emch [13].

4.) Ist A selbstadjungiert, dann ist auch B_A selbstadjungiert.

Beweis: ad(iii): Mit dem Satz von Fubini gilt

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t \text{tr}(AU(s)WU(s)^*) ds &= \\ &= \lim_{t \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}^2} \left[\frac{1}{t} \int_0^t e^{i(\lambda - \nu)s} ds \right] d\text{tr}(AE(\lambda)WE(\nu)) \quad . \end{aligned} \quad (\text{M1.25})$$

Nun ist

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t e^{i(\lambda - \nu)s} ds = \begin{cases} 1 & \text{auf } \{(\lambda, \nu) \in \mathbb{R}^2 \mid \lambda = \nu\} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (\text{M1.26})$$

1 ist eine majorisierende Funktion des Integranden. Also ist nach dem Satz von der majorisierten Konvergenz

$$(\text{M1.25}) = \int_{\{(\lambda, \nu) \in \mathbb{R}^2 \mid \lambda = \nu\}} d\text{tr}(AE(\lambda)WE(\nu)) = \text{tr}(B_A W). \quad (\text{M1.27})$$

Die Beschränktheit von B_A folgt unmittelbar aus der Definition. Es ist

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t \langle \varphi | U(r+s)^* AU(r+s) \varphi \rangle ds &= \langle \varphi | B_A \varphi \rangle \\ &= \langle U(r) \varphi | B_A U(r) \varphi \rangle \end{aligned} \quad (\text{M1.28})$$

für alle $r \in \mathbb{R}$ und alle $\varphi, \psi \in \mathcal{H}$. Also ist $[H, B_A] = 0$.

Weiterhin gilt

$$\langle \varphi | [A, B_A] \varphi \rangle =$$

$$= \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t (\langle B_A^* \varphi | U(s)^* A U(s) \varphi \rangle - \langle \varphi | U(s)^* A U(s) B_A \varphi \rangle) ds \quad (M1.29)$$

$$= \langle B_A^* \varphi | B_A \varphi \rangle - \langle \varphi | B_A^2 \varphi \rangle = 0$$

für alle $\varphi, \psi \in \mathcal{H}$. Also ist $[A, B_A] = 0$.

M2. Das Spektrum von Liouvilleoperatoren und der Limes $t \rightarrow \infty$
klassischer Erwartungswerte

Der nachfolgende Satz M2.1 ist wohl das erste Mal von Hopf [27] bewiesen worden. Da dieser Satz für unsere Arbeit sehr wichtig ist und der Beweis in [27] etwas versteckt ist, geben wir den Beweis noch einmal ausführlich an. Wir folgen dabei einer Idee von Halmos [22].

Satz M2.1 (Satz 2.6): Sei (Γ, μ, T_t) ein Hamiltonsches System mit Liouvilleoperator L und induzierter unitärer Gruppe $U(t) = e^{iLt}$.

(i) Ist das Spektrum von L bis auf die Null absolut stetig, dann gilt für alle $f, g \in \mathcal{K}$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle g | U(t)f \rangle = \langle g | P_0 f \rangle . \quad (M2.1)$$

(ii) Das Spektrum von L ist genau dann bis auf die Null stetig, wenn für alle $f, g \in \mathcal{K}$ gilt

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t |\langle g | U(s)f \rangle - \langle g | P_0 f \rangle|^2 ds = 0 . \quad (M2.2)$$

Beweis: Es genügt, (M2.1) und (M2.2) für $f = g$ zu zeigen. Mit Hilfe der Polarisationsidentität folgt dann (M2.1) und (M2.2) für alle $f, g \in \mathcal{K}$. Für $f \in P_0 \mathcal{K}$ ist (M2.1) und (M2.2) erfüllt. Es sei also $f \in (1 - P_0) \mathcal{K}$. $E(\lambda)$ sei die Spektralschar von L .

ad(i): Es ist zu zeigen, daß

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle f | U(t)f \rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}} e^{i\lambda t} d\|E(\lambda)f\|^2 = 0 . \quad (M2.3)$$

Dies folgt aus dem Lemma von Riemann-Lebesgue, da $d\|E(\lambda)f\|^2$ nach Voraussetzung ein absolut stetiges Maß auf $\mathbb{R}$ ist.

ad(ii): " $\Rightarrow$ " Es ist zu zeigen, daß

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t |\langle f | U(s)f \rangle|^2 ds = 0 \quad . \quad (M2.4)$$

Mit dem Satz von Fubini ist

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t |\langle f | U(s)f \rangle|^2 ds &= \\ &= \lim_{t \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R} \times \mathbb{R}} \left[\frac{1}{t} \int_0^t e^{i(\lambda - \nu)s} ds \right] d\|E(\lambda)f\|^2 \times d\|E(\nu)f\|^2 \quad . \end{aligned} \quad (M2.5)$$

Für den Integranden gilt

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t e^{i(\lambda - \nu)s} ds = \begin{cases} 1 & \text{für } \lambda = \nu \\ 0 & \text{für } \lambda \neq \nu \end{cases} = 0 \text{ f.ü.} \quad , \quad (M2.6)$$

da nach Voraussetzung $d\|E(\lambda)f\|^2 \times d\|E(\nu)f\|^2$ ein stetiges Maß auf $\mathbb{R}^2$ ist. 1 ist eine majorisierende Funktion des Integranden. Sie ist integrierbar, da $d\|E(\lambda)f\|^2 \times d\|E(\nu)f\|^2$ ein endliches Maß auf $\mathbb{R}^2$ ist. Also folgt (M2.4) mit dem Satz von der majorisierten Konvergenz.

" $\Leftarrow$ " Es existiere ein $f \in \mathfrak{K}$, $f \neq 0$, mit $Lf = \lambda f$, $\lambda \neq 0$.

Dann ist

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t |\langle f | U(s)f \rangle|^2 ds = |\langle f | f \rangle|^2 \neq 0 \quad . \quad (M2.7)$$

Dies ist ein Widerspruch zu (M2.2). Also hat L außerhalb der Null keinen Eigenwert.

Lemma M2.2. Sei (Γ, μ, T_t) ein relaxierendes Hamiltonsches System mit Liouvilleoperator L . Dann gilt für alle $f \in D(L)$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle Lf | e^{iLt} Lf \rangle = 0 \quad (\text{M2.8})$$

und für alle reellwertigen $f \in D(L)$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t \langle Lf | e^{iLs} Lf \rangle ds = 0 \quad (\text{M2.9})$$

Beweis: Da (Γ, μ, T_t) relaxierend ist, ist

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle Lf | e^{iLt} Lf \rangle = \langle f | LP_0 Lf \rangle = 0, \text{ da } LP_0 f = 0 \text{ für alle } f \in D(L).$$

Es ist

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t \langle Lf | e^{iLs} Lf \rangle ds = -i \langle f | LP_0 f \rangle + i \langle f | Lf \rangle = i \langle f | Lf \rangle. \quad (\text{M2.10})$$

Da f reellwertig ist, gilt $\langle f | Lf \rangle = \langle f | Lf \rangle^{**} = (i^* \langle f | [H, f] \rangle)^* = -\langle f | Lf \rangle^* = -\langle f | Lf \rangle$. Also ist $\langle f | Lf \rangle = 0$ für alle reellwertigen $f \in D(L)$.

M3. Invariante Mengen Hamiltonscher Systeme

Sei (Γ, μ, T_t) ein Hamiltonsches System mit Liouvilleoperator L . Eine meßbare Menge $\Delta \subset \bar{\Gamma}$ heißt invariant (f.ü. invariant) (bezüglich T_t), wenn

$$T_t \Delta = \Delta \quad (\text{f.ü.}) \quad (\text{M3.1})$$

für alle $t \in \mathbb{R}$. Bei der Untersuchung Hamiltonscher Systeme und der spektralen Eigenschaften ihrer Liouvilleoperatoren spielen die invarianten Mengen eine ausgezeichnete Rolle. Wir wollen deswegen einige ihrer Eigenschaften in diesem Abschnitt auf-führen.

Ist $\Delta \subset \Gamma$ eine offene, zusammenhängende und invariante Menge, dann ist auch (Δ, μ, T_t) ein Hamiltonsches System. Wir gewinnen solche Mengen etwa durch

$$\Delta = \bigcup_{t=-\infty}^{t=\infty} T_t \Omega \quad (\text{M3.2})$$

mit offenem und zusammenhängendem $\Omega \subset \Gamma$.

Es ist oft nützlich, L eingeschränkt auf einen reduzierenden Unterraum $P\mathcal{X}$ zu betrachten. Das folgende Lemma zeigt, daß jede f.ü. invariante Menge einen reduzierenden Unterraum definiert.

Lemma M3.1. Sei $\Delta \subset \bar{\Gamma}$ f.ü. invariant und P die Projektion auf $\mathcal{L}^2(\Delta, d\mu) \subset \mathcal{X}$. Dann wird L von $P\mathcal{X}$ reduziert, d.h.

$$PL \subset LP \quad . \quad (\text{M3.3})$$

Beweis: Es sei $U(t) = e^{iLt}$. Dann gilt für alle $f \in \mathcal{X}$

$$U(t)Pf = (\{_{\Delta} f) \circ T_t = \{_{\Delta} (f \circ T_t) = PU(t)f \quad . \quad (M3.4)$$

Sei $\mathcal{U}$ die Menge aller invarianten Mengen und $\mathcal{U}_{f.ü.}$ die Menge aller f.ü. invarianten Mengen. Man überzeugt sich leicht, daß $\mathcal{U}$ und $\mathcal{U}_{f.ü.}$ σ -Algebren sind. Zur Untersuchung ihrer Eigenschaften führen wir zwei weitere Begriffe ein.

Nach Hopf [25] heißt ein Punkt $x \in \Gamma$ fliehend, wenn die Phasenbahn $T_t x$ für $t \rightarrow \infty$ keinen Häufungspunkt in Γ besitzt. Ein Punkt $x \in \Gamma$ heißt wiederkehrend, wenn x Häufungspunkt der Punkte $T_t x$ für $t \rightarrow \infty$ ist. Hopf zeigt: Bis auf eine Menge vom Maß Null ist die Menge der fliehenden Punkte gleich der Menge der Punkte mit unbeschränkten Phasenbahnen. Bis auf eine Menge vom Maß Null sind alle Punkte von Γ entweder fliehend oder wiederkehrend. Ist $\Delta \subset \bar{\Gamma}$ f.ü. invariant und $\mu(\Delta) < \infty$, dann sind fast alle Punkte von Δ wiederkehrend (Poincaréscher Wiederkehrsatz).

Es sei nun $\Gamma_2 \in \mathcal{U}$ die Menge der fliehenden Punkte und $\Gamma_1 = \bar{\Gamma} \setminus \Gamma_2$. Dann gelten die Lemmata.

Lemma M3.2. Sei $\Delta \in \mathcal{U}_{f.ü.} \cap \Gamma_2 > \mathcal{U} \cap \Gamma_2$. Dann ist $\mu(\Delta) = 0$ oder $\mu(\Delta) = \infty$.

Beweis: Es sei $0 < \mu(\Delta) < \infty$. Nach dem Poincaréschen Wiederkehrsatz sind dann fast alle Punkte von Δ wiederkehrend. Also ist $\mu(\Delta \cap \Gamma_2) = 0$. Dies ist ein Widerspruch.

Lemma M3.3. $(\Gamma_1, \mathcal{U} \cap \Gamma_1, \mu)$ und $(\Gamma_1, \mathcal{U}_{f.ü.} \cap \Gamma_1, \mu)$ sind σ -endlich.

Beweis: K_n sei die $2N$ -dimensionale Kugel mit Radius $n \in \mathbb{N}$. Es sei

$$\mathcal{U}_n = \{ \Delta \in \mathcal{U} \cap \Gamma_1 \mid \Delta \subset K_n \} \quad (M3.5)$$

und Δ_n die größte Menge in $\mathcal{A}_n$ (bzgl. $\subset$). Da $\Delta_n \in K_n$, ist $\mu(\Delta_n) < \infty$. Es gilt $\Delta_m \subset \Delta_n$ für $m < n$ und

$$\bigcup_{n \in \mathbb{N}} \Delta_n = \Gamma_1 \quad \cdot \cdot \quad (M3.6)$$

Es existiere nämlich ein $x \in \Gamma_1 \setminus \bigcup_{n \in \mathbb{N}} \Delta_n$. Dann ist x fliehend.
Dies ist ein Widerspruch. $(\Gamma_1, \alpha \cap \Gamma_1, \mu)$ ist also σ -endlich.
Der Beweis für $(\Gamma_1, \alpha_{f.u.} \cap \Gamma_1, \mu)$ geht analog.

Lemma M3.4. Zu der σ -Algebra $\mathcal{A} \cap \Gamma_1$ existiert ein Erzeuger $\{\Delta_y | y \in [0,1]\}$ mit den Eigenschaften: $\Delta_0 = \emptyset$, $\Delta_1 = \Gamma_1$ und $\Delta_y \subset \Delta_{y'}$, genau dann, wenn $y \leq y'$.

Beweis: von Neumann [47].

Das folgende Lemma zeigt, daß wir bei f.ü. invarianten Funktionen und Mengen im gewissen Sinn auf den Zusatz f.ü. verzichten können.

Lemma M3.5. Sei $f: \overline{T} \rightarrow \mathbb{C}$ meßbar und $f \circ T_t = f$ f.ü. für alle $t \in \mathbb{R}$.
Dann existiert eine meßbare Funktion $\overline{f}$ mit $\overline{f} = f$ f.ü. und
 $\overline{f} \circ T_t = \overline{f}$ für alle $t \in \mathbb{R}$.

Beweis: [27, Hilfssatz 9.1].

Wählen wir f als charakteristische Funktion einer f.ü. invarianten Menge Δ , so folgt, daß eine invariante Menge $\bar{\Delta}$ existiert mit $\Delta = \bar{\Delta}$ f.ü..

Mit Hilfe von Lemma M3.5 können wir den Unterraum P_0^2 in befriedigender Weise charakterisieren.

Lemma M3.6. $P_0\mathcal{K}$ ist die Menge aller bezüglich $\mathcal{U}$ meßbarer, quadratintegrabler Funktionen $f: \bar{\Gamma} \rightarrow \mathbb{C}$. Für jedes $f \in P_0\mathcal{K}$ gilt $f = 0$ f.ü. auf Γ_2 .

Beweis: Sei $f \in P_0\mathcal{K}$. Nach Lemma M3.5 ist f so wählbar, daß $f \circ T_t = f$ für alle $t \in \mathbb{R}$. Also ist f bezüglich $\mathcal{U}$ meßbar.

Sei $f \circ T_t = f$ f.ü. und $f \neq 0$ f.ü. auf $\Delta \subset \Gamma_2$ mit $\mu(\Delta) \neq 0$. Aus Lemma M3.2 folgt dann $\|f\| = \infty$. Also ist f nicht in $P_0\mathcal{K}$.

Es ist nun leicht, den Beweis zu Satz 2.5 zu führen.

Beweis von Satz 2.5: Wir wählen Γ_1 wie oben definiert. Nach Lemma M3.6 ist $\Gamma_1 \in \{\Delta_j | j \in I\}$. Angenommen es existiere nun ein $\Delta_k \subset \Gamma_1$, $k \in I$, mit $\mu(\Gamma_1 \setminus \Delta_k) \neq 0$. Da nach Lemma M3.3 $(\Gamma_1, \mathcal{U} \cap \Gamma_1, \mu)$ σ -endlich ist, existiert eine Zerlegung von Γ_1 in invariante Mengen von endlichem Maß. Also ist $P_0\mathcal{L}^2(\Gamma_1 \setminus \Delta_k) \neq \{0\} \neq P_0\mathcal{L}^2(\bar{\Gamma} \setminus \Delta_k)$ im Widerspruch zur Definition von Δ_k . Also ist $\Gamma_1 = \bar{\Gamma}_1$ f.ü. und somit folgt (i) und (ii) unmittelbar aus der Definition von Γ_1 .

Zum Beweis von (iii) sei $\rho \in \mathcal{K}_1$ mit $\rho \geq 0$ und $\int \rho d\mu = 1$. Dann ist

$$P_0\rho = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t \rho \circ T_{-s} ds. \quad (\text{M3.7})$$

Also ist $P_0\rho \geq 0$. Nach Lemma M3.3 existiert eine Zerlegung $\{\Omega_n | n \in \mathbb{N}\}$ von Γ_1 mit $\mu(\Omega_n) < \infty$. Dann gilt in jedem $\mathcal{L}^2(\Omega_n, d\mu)$

$$\langle 1 | P_0\rho \rangle = \langle 1 | \rho \rangle \quad (\text{M3.8})$$

und somit

$$\int_{\Gamma} P_0 \rho \, d\mu = \sum_{n \in \mathbb{N}} \int_{\Omega_n} \rho \, d\mu = \int_{\Gamma} \rho \, d\mu = 1 . \quad (M3.9)$$

Da $P_0 \rho \in \mathcal{X}_1$, ist also $P_0 \rho$ ein gebundener Zustand.

ad (iv): Wir zeigen, daß für jedes meßbare und beschränkte

$$\Delta \subset \Gamma_2$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \mu(\Delta \cap T_t \Delta) = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle \chi_{\Delta} | U(t) \chi_{\Delta} \rangle = 0 . \quad (M3.10)$$

Da die Menge der Treppenfunktionen dicht in $\mathcal{L}^2(\Gamma_2, d\mu)$ liegt, folgt $\lim_{t \rightarrow \infty} \langle f | U(t) f \rangle = 0$ für alle $f \in \mathcal{L}^2(\Gamma_2, d\mu)$. Aus der Polarisationsidentität folgt dann die Behauptung (2.17).

Sei $\Delta \subset \Gamma_2$ meßbar und beschränkt. $\Delta_n \subset \Delta$, $n \in \mathbb{N}$, sei die Menge aller Punkte aus Δ , die Δ in dem Zeitintervall $[n-1, n[$ endgültig verlassen. Da alle Punkte von Γ_2 fliehend sind, gilt $\Delta = \bigcup_{n \in \mathbb{N}} \Delta_n$ f.ü.. Mit Hilfe des Satzes von der majorisierten Konvergenz folgt dann

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \mu(\Delta \cap T_t \Delta) = \lim_{t \rightarrow \infty} \sum_{n \in \mathbb{N}} \mu(\Delta \cap T_t \Delta_n) = 0 . \quad (M3.11)$$

M4. Spektrale Eigenschaften von Liouvilleoperatoren separierbarer Hamiltonscher Systeme

M4.1 Vorbemerkungen und Notationen

Abweichend von unserem bisherigen Gebrauch wollen wir in diesem Abschnitt mit μ das N-dimensionale und mit μ_{2N} das 2N-dimensionale Lebesguemaß bezeichnen.

Sei (Γ, μ_{2N}, T_t) ein separierbares Hamiltonsches System ^{*)} mit Hamiltonfunktion $\tilde{H}$ und Liouvilleoperator $\tilde{L}$ und sei $(\Omega \times T^N, \mu \times \mu, S \circ T_t \circ S^{-1})$ das zugehörige transformierte System mit Hamiltonfunktion H und Liouvilleoperator L . Wir bezeichnen die Koordinaten in Ω mit $\{J_1, \dots, J_N\} = J$ (Wirkungsvariable) und die Koordinaten des N-dimensionalen Torus T^N mit $0 \leq w_1 < 2\pi, \dots, 0 \leq w_N < 2\pi, \{w_1, \dots, w_N\} = w$ (Winkelvariable).

Die transformierte Hamiltonfunktion $\tilde{H} \circ S^{-1} = H: \Omega \times T^N \rightarrow \mathbb{R}$ ist zweimal stetig differenzierbar. Jede Funktion $h \in C^2(\Omega, \mathbb{R})$ mit beliebigem offenem und zusammenhängendem $\Omega \subset \mathbb{R}^N$, die trivial auf T^N fortgesetzt wird, ist offensichtlich das Bild der Hamiltonfunktion eines separierbaren Hamiltonschen Systems. Die transformierte kanonische Gruppe ist gegeben durch

$$S \circ T_t \circ S^{-1}: \begin{array}{l} J \mapsto J \\ w \mapsto w + t(\text{grad } H) \pmod{2\pi} \end{array} \quad (\text{M4.1})$$

mit $\text{grad } H = \left\{ \frac{\partial H}{\partial J_1}, \dots, \frac{\partial H}{\partial J_N} \right\}$.

Sei $U_S: \mathcal{L}^2(\Gamma, d\mu_{2N}) \rightarrow \mathcal{L}^2(\Omega \times T^N, d\mu \times \mu)$ die von S induzierte unitäre Transformation. Nach dem Satz von Koopman gilt dann

^{*)} Für die Definition siehe Abschnitt 5.2.

$$U_S \tilde{L} U_S^{-1} = L \quad (\text{M4.2})$$

auf $D(L) \subset \mathcal{X}^2(\Omega, T^N, d\mu, \mu)$. $\tilde{L}$ und L sind also unitär äquivalent.

M4.2 Ein Zerlegungssatz

Satz M4.1. Sei $H \in C^2(\Omega, \mathbb{R})$ mit offenem und zusammenhängendem $\Omega \subset \mathbb{R}^N$. Dann existieren

- (i) abzählbar viele abgeschlossene Mengen $\Omega_j \subset \bar{\Omega}$, $j \in \tilde{I}$, mit $\mu(\Omega_j) \neq 0$, $\mu(\Omega_j \cap \Omega_k) = 0$ für $j \neq k$ und $\bigcup_{j \in \tilde{I}} \Omega_j = \bar{\Omega}$,
- (ii) zu jeder Menge Ω_j ein linearer Teilraum $M_j \subset \mathbb{R}^N$ und eine freie additive Gruppe $G_j \subset \mathbb{R}$ mit $\text{Rang} \leq \dim M_j$,

so daß gilt:

- (iii) Zu jedem $\vec{n} \in M_j \cap \mathbb{Z}^N$ existiert ein $c \in G_j$ und umgekehrt existiert zu jedem $c \in G_j$ ein $\vec{n} \in M_j \cap \mathbb{Z}^N$ mit der Eigenschaft

$$\vec{n} \cdot \text{grad } H = c \quad (\text{M4.3})$$

auf Ω_j .

- (iv) Für alle $\vec{n} \in (\mathbb{R}^N \setminus M_j) \cap \mathbb{Z}^N$ und alle $c \in \mathbb{R}$ ist

$$\mu((\vec{n} \cdot \text{grad } H)^{-1}(\{c\}) \cap \Omega_j) = 0. \quad (\text{M4.4})$$

Dabei sind die Mengen Ω_j , $j \in \tilde{I}$, bis auf eine Menge vom Maß Null, die Teilräume M_j und die Gruppen G_j eindeutig durch H bestimmt.

Lemma M4.2. Sei $f \in C^1(\Omega, \mathbb{R})$. Dann existieren abzählbar viele abgeschlossene und disjunkte Mengen $\Delta_k \subset \bar{\Omega}$ mit $\mu(\Delta_k) \neq 0$,

so daß $\Delta_k = f^{-1}(\{c_k\})$, $c_k \in \mathbb{R}$, und $\mu(f^{-1}(\{c\})) = 0$ für $c \neq c_k$.

Lemma M4.3. $\{\Delta_j | j \in I\}$ sei eine abzählbare Menge von meßbaren Mengen mit den Eigenschaften:

$$(a1) \quad \mu(\Delta_j) \neq 0.$$

$$(a2) \quad \Delta_j \neq \Delta_k \text{ f.ü. für } j \neq k.$$

(a3) Ist $\mu(\Delta_j \cap \Delta_k) \neq 0$, dann existiert ein Index $l \in I$, so daß

$$\Delta_j \cap \Delta_k = \Delta_l \text{ f.ü..}$$

(a4) Es existiert eine Abbildung $f: I \rightarrow \{0, 1, \dots, N\}$, für die aus $\Delta_j \cap \Delta_k = \Delta_l$ f.ü. folgt, daß $f(l) > \min\{f(j), f(k)\}$
 $j \neq k, j, k, l \in I$.

Dann existiert eine abzählbare Menge $\{\Omega_j | j \in \tilde{I} \subset I\}$ von meßbaren Mengen mit den Eigenschaften:

$$(b1) \quad \mu(\Omega_j) \neq 0.$$

$$(b2) \quad \mu(\Omega_j \cap \Omega_k) = 0 \text{ für } j \neq k.$$

(b3) Jedes Δ_k , $k \in I$, läßt sich darstellen als

$$\Delta_k = \bigcup_{j \in \tilde{I}(k) \subset \tilde{I}} \Omega_j \text{ f.ü.} \quad (M4.5)$$

Beweis: Es sei $f^{-1}(N) = I(N) \subset I$. Dann ist für $j, k \in I(N)$, $j \neq k$,

$$\mu(\Delta_j \cap \Delta_k) = 0.$$

Es sei nämlich $\mu(\Delta_j \cap \Delta_k) \neq 0$. Dann ist nach (a3)

$\Delta_j \cap \Delta_k = \Delta_l$ f.ü. und nach (a4) $f(l) > N$. Dies ist ein Widerspruch.

Wir setzen $\Delta_k = \Omega_k$ für $k \in I(N)$. Für alle $k \in I \setminus I(N)$ definieren wir

$$\Delta_k^{(N-1)} = \Delta_k \setminus \bigcup_{j \in I(N)} \Delta_j \quad (M4.6)$$

Es sei $f^{-1}(N-1) = I(N-1) \subset I$. Für alle $k \in I(N-1)$ setzen wir $\Omega_k = \Delta_k^{(N-1)}$. Dann hat die Menge $\{\Omega_j | j \in I(N) \cup I(N-1)\}$ die Eigenschaft (b2).

Für $k \in I(N)$ und $l \in I(N-1)$ ist nämlich $\mu(\Omega_k \cap \Omega_l) = 0$ nach Konstruktion. Es sei also $k, l \in I(N-1)$ und $\mu(\Omega_k \cap \Omega_l) \neq 0$. Mit

$$\Omega_k \cap \Omega_l = (\Delta_k \cap \Delta_l) \setminus \bigcup_{j \in I(N)} \Delta_j \quad (M4.7)$$

folgt, daß $\mu(\Delta_k \cap \Delta_l) \neq 0$ und somit nach (a3) $\Delta_k \cap \Delta_l = \Delta_i$ f.ä. für ein Index $i \in I \setminus I(N)$. Dann ist aber nach (a4) $f(i) > N-1$. Dies ist ein Widerspruch.

Für alle $k \in I \setminus (I(N) \cup I(N-1))$ definieren wir

$$\Delta_k^{(N-2)} = \Delta_k^{(N-1)} \setminus \bigcup_{j \in I(N-1)} \Delta_j^{(N-1)} \quad (M4.8)$$

und setzen das obige Verfahren fort. Nach $N+1$ Schritten erhalten wir die Menge $\{\Omega_j | j \in I\}$. Durch Fortlassen von Mengen mit dem Maß Null entsteht die abzählbare Menge $\{\Omega_j | j \in \tilde{I} \subset I\}$ mit den Eigenschaften (b1) bis (b3).

Beweis von Satz M4.1: Nach Voraussetzung ist $\vec{n} \cdot \text{grad } H \in C^1(\Omega, \mathbb{R})$.

Nach Lemma M4.2 existieren also zu jedem Index $\vec{n} \in \mathbb{Z}^N$ abzählbar viele abgeschlossene und disjunkte Mengen $\Delta_k^{(\vec{n})} \subset \bar{\Omega}$, $k \in I(\vec{n})$, mit $\mu(\Delta_k^{(\vec{n})}) \neq 0$ und

$$\vec{n} \cdot \text{grad } H = c_k^{(\vec{n})} \in \mathbb{R} \quad (M4.9)$$

auf $\Delta_k^{(\vec{n})}$.

Wir zerlegen $\{\Delta_k^{(\vec{n})} | \vec{n} \in \mathbb{Z}^N, k \in I(\vec{n})\}$ bezüglich des Maßes μ

in Äquivalenzklassen (Δ' äquivalent zu Δ'' genau dann, wenn $\Delta' = \Delta''$ f.ü..) mit Repräsentanten $\Delta_j, j \in I_1$. Ist $\Delta = \bigcap_{j \in I_1' \subset I_1} \Delta_j$ mit $\text{card } I_1' \leq N$ und $\mu(\Delta) \neq 0$, dann fügen wir Δ der Menge $\{\Delta_j | j \in I_1\}$ hinzu. Unterdrücken wir wiederum äquivalente Mengen, so erhalten wir die abzählbare Menge $\{\Delta_j | j \in I \supset I_1\}$.

Es sei $\Delta_k^{(\vec{n})} \supset \Delta_j$ f.ü., $j \in I$. Wir ordnen dann Δ_j den Vektor $\vec{n}$ und die Zahl $c_k^{(\vec{n})}$ aus (M4.9) zu. Auf diese Weise sind Δ_j die abzählbar vielen Vektoren $\tilde{M}_j = \{\vec{n}_i^{(j)} | i \in I(j)\}$ und die abzählbar vielen Zahlen $G_j = \{c_i^{(j)} | i \in I(j)\}$ zugeordnet. Nach (M4.9) gilt

$$\vec{n}_i^{(j)} \cdot \text{grad } H = c_i^{(j)} \quad \text{f.ü.} \quad (\text{M4.10})$$

auf Δ_j für alle $j \in I$ und alle $i \in I(j)$.

Behauptung 1. Es existiert genau ein linearer Teilraum $M_j \subset \mathbb{R}^N$, so daß $\tilde{M}_j = M_j \cap \mathbb{Z}^N$.

Beweis: M_j sei die lineare Hülle von $\tilde{M}_j$. Es sei $\vec{n} \in M_j \cap \mathbb{Z}^N$, aber $\vec{n} \notin \tilde{M}_j$. Durch Linearkombination folgt aus (M4.10)

$$\vec{n} \cdot \text{grad } H = c \in \mathbb{R} \quad \text{f.ü.} \quad (\text{M4.11})$$

auf Δ_j . Zu $\vec{n}$ und c gehöre die Menge $\Delta_1^{(\vec{n})} \subset \bar{\Omega}$. Wegen (M4.11) ist dann $\Delta_1^{(\vec{n})} \supset \Delta_j$ f.ü. und somit gilt $\vec{n} \in \tilde{M}_j$. Dies ist ein Widerspruch.

Behauptung 2. $G_j \subset \mathbb{R}$ ist eine freie additive Gruppe mit $\text{Rang} \leq \dim M_j$.

Beweis: Es sei $c_{i_1}^{(j)}, c_{i_2}^{(j)} \in G_j, i_1, i_2 \in I(j)$. Nach (M4.10) gilt

$$\vec{n}_{i_1}^{(j)} \cdot \text{grad } H = c_{i_1}^{(j)} \text{ f.ü.}, \quad \vec{n}_{i_2}^{(j)} \cdot \text{grad } H = c_{i_2}^{(j)} \text{ f.ü.} \quad (\text{M4.12})$$

auf Δ_j und somit

$$(\vec{n}_{i_1}^{(j)} \pm \vec{n}_{i_2}^{(j)}) \cdot \text{grad } H = c_{i_1}^{(j)} \pm c_{i_2}^{(j)} \text{ f.ü.} \quad (\text{M4.13})$$

auf Δ_j . Da $\vec{n}_{i_1}^{(j)} \pm \vec{n}_{i_2}^{(j)} \in M_j \cap \mathbb{Z}^N$, ist auch $c_{i_1}^{(j)} \pm c_{i_2}^{(j)} \in G_j$. Also ist G_j eine additive Gruppe.

Wir wählen die linear unabhängigen Vektoren

$\vec{n}_1^{(j)}, \dots, \vec{n}_{\dim M_j}^{(j)} \in M_j \cap \mathbb{Z}^N$ so, daß jedes $\vec{n} \in M_j \cap \mathbb{Z}^N$ sich als Linearkombination mit ganzen Zahlen darstellen läßt. Dann sind die zugehörigen Zahlen $c_1^{(j)}, \dots, c_{\dim M_j}^{(j)}$ erzeugende Elemente der

Gruppe G_j . Dies ist die größte mögliche Anzahl von erzeugenden Elementen, da je $\dim M_j + 1$ Vektoren aus M_j linear und somit je $\dim M_j + 1$ Elemente aus G_j rational abhängig sind. Also ist G_j eine freie Gruppe mit $\text{Rang} \leq \dim M_j$.

Behauptung 3. Die Menge $\{\Delta_j | j \in I\}$ hat die Eigenschaften (a1) bis (a4) aus Lemma M4.3. Dabei definieren wir $f: k \in I \mapsto \dim M_k$.

Beweis: (a1) und (a2) ist nach Konstruktion von $\{\Delta_j | j \in I\}$ erfüllt.

ad (a3): Es sei $\Delta = \bigcap_{j \in I_1' \subset I_1} \Delta_j$ mit $\mu(\Delta) \neq 0$. Dann sind Δ die Vektoren $\{\vec{n}_i^{(j)} | j \in I_1', i \in I(j)\}$ zugeordnet. Wir wählen $s \leq N$ linear unabhängige Vektoren $\vec{n}_1, \dots, \vec{n}_s$ aus. Die zugehörigen Mengen seien $\Delta_j, j \in I_1' \subset I_1, \text{card } I_1' \leq N$.

Offensichtlich ist

$$\Delta \subset \bigcap_{j \in I'_1} \Delta_j \quad \text{f.ü.} \quad . \quad (\text{M4.14})$$

Nach Konstruktion läßt sich jedes $\vec{n}_i^{(j)} \in \{\vec{n}_i^{(j)} \mid j \in I'_1, i \in I(j)\}$ darstellen als

$$\vec{n}_i^{(j)} = \sum_{k=1}^s a_k(i,j) \vec{n}_k \quad , \quad (\text{M4.15})$$

$a_k(i,j) \in \mathbb{R}$. Also gilt

$$\vec{n}_i^{(j)} \cdot \text{grad } H = \sum_{k=1}^s a_k(i,j) (\vec{n}_k \cdot \text{grad } H) \quad . \quad (\text{M4.16})$$

Da $\vec{n}_k \cdot \text{grad } H = \text{const. f.ü. auf } \bigcap_{1 \in I'_1} \Delta_1$ für alle $k = 1, \dots, s$, folgt somit für alle $j \in I'_1$

$$\Delta_j \supset \bigcap_{k \in I'_1} \Delta_k \quad \text{f.ü.} \quad , \quad (\text{M4.17})$$

also

$$\Delta = \bigcap_{j \in I'_1} \Delta_j \supset \bigcap_{j \in I'_1} \Delta_j \quad \text{f.ü.} \quad . \quad (\text{M4.18})$$

Δ läßt sich also schon als Schnitt von höchstens N Mengen

$\Delta_j, j \in I_1$, darstellen. Demnach ist $\Delta \in \{\Delta_j \mid j \in I\}$ und $\{\Delta_j \mid j \in I\}$ abgeschlossen gegenüber Schnittbildung.

ad (a4): Es ist zu zeigen, daß für $\Delta_j \cap \Delta_k = \Delta_l$ f.ü., $j \neq k$, $j, k, l \in I$ gilt $\dim M_l > \min\{\dim M_j, \dim M_k\}$.

Nach Definition ist $M_l \supset M_j$ und $M_l \supset M_k$. Es sei nun $M_j = M_k$.

Da $\mu(\Delta_j \cap \Delta_k) \neq 0$, ist auch $G_j = G_k$. Für alle $m \in I$ läßt sich

Δ_m als Schnitt aller Δ_m umfassenden Mengen $\Delta_i^{(\vec{n})}$ darstellen:

$$\Delta_m = \bigcap_{\vec{n} \in M_m \cap \mathbb{Z}^N, \{i \in I(\vec{n}) \mid c_i(\vec{n}) \in G_m\}} \Delta_i^{(\vec{n})} \quad \text{f.ü.} \quad (M4.19)$$

Also ist $\Delta_j = \Delta_k$ f.ü.. Dies ist ein Widerspruch. Also ist $M_j \neq M_k$, womit die Behauptung folgt.

Mit Lemma M4.3, Behauptung 1, 2 und 3 ist die Existenz der Mengen Ω_j , $j \in \tilde{I} \subset I$, mit den Eigenschaften (i) und (ii) (ohne Abgeschlossenheit) nachgewiesen. Da $\Delta_1^{(0)} = \bar{\Omega}$, ist nämlich nach (M4.5) $\bar{\Omega} = \bigcup_{j \in \tilde{I}} \Omega_j$.

Nach (M4.10) und Behauptung 1 und 2 existiert zu jedem $\vec{n} \in M_j \cap \mathbb{Z}^N$ ein $c \in G_j$ und umgekehrt existiert zu jedem $c \in G_j$ ein $\vec{n} \in M_j \cap \mathbb{Z}^N$, so daß

$$\vec{n} \cdot \text{grad } H = c \quad \text{f.ü.} \quad (M4.20)$$

auf Ω_j für alle $j \in \tilde{I}$. Da $H \in C^2(\Omega, \mathbb{R})$, können wir die Mengen Ω_j jeweils durch Mengen vom Maß Null so abändern, daß (M4.20) auf ganz Ω_j gilt und Ω_j abgeschlossen ist.

Wir zeigen noch (iv). Es sei $\vec{n} \in (\mathbb{R}^N \setminus M_j) \cap \mathbb{Z}^N$ und $\vec{n} \cdot \text{grad } H = c \in \mathbb{R}$ auf $\Delta \subset \Omega_j$ mit $\mu(\Delta) \neq 0$. Zu $\vec{n}$ und c gehöre nach (M4.9) die Menge $\Delta_1^{(\vec{n})} \supset \Delta$, die in der Äquivalenzklasse mit Repräsentantem $\Delta_1 \supset \Delta$ f.ü. enthalten sei. Es ist also

$\mu(\Omega_j \cap \Delta_1) \neq 0$ und somit nach Lemma M4.3(b3) $\Omega_j \subset \Delta_1$ f.ü..

Also ist nach Definition $M_j \supset M_1$ und somit $\vec{n} \in M_j \cap \mathbb{Z}^N$. Dies ist ein Widerspruch. Also ist $\mu((\vec{n} \cdot \text{grad } H)^{-1}(\{c\}) \cap \Omega_j) = 0$ für alle $\vec{n} \in (\mathbb{R}^N \setminus M_j) \cap \mathbb{Z}^N$ und alle $c \in \mathbb{R}$.

M4.3 Das Spektrum

Satz M4.4. Sei (T, μ_{2N}, T_t) ein separierbares Hamiltonsches System mit Liouvilleoperator $\tilde{L}$ und sei $(\Omega \times T^N, d\mu, \mu, S \circ T_t \circ S^{-1})$ das zugehörige transformierte System mit Hamiltonfunktion H . H aufgefaßt als Funktion aus $C^2(\Omega, \mathbb{R})$ seien nach Satz M4.1 die Mengen $\Omega_j \subset \bar{\Omega}$, die linearen Teilräume $M_j \subset \mathbb{R}^N$ und die Gruppen $G_j \subset \mathbb{R}$, $j \in I$, zugeordnet. Dann gilt:

$$(i) \quad \sigma_{pp}(\tilde{L}) = \bigcup_{j \in I} G_j \supset \{0\} . \quad (M4.21)$$

(ii) Jeder Eigenwert ist unendlichfach entartet.

$$(iii) \quad \sigma_c(\tilde{L}) = \bigcup_{\substack{n \in \mathbb{Z}^N \\ n \cdot \text{grad } H \neq \text{const. auf } \Omega}} \overline{\text{rng}(n \cdot \text{grad } H)} . \quad (M4.22)$$

(iv) Gilt für alle $j \in I$ und alle $n \in (\mathbb{R}^N \setminus M_j) \cap \mathbb{Z}^N$

$$\text{grad } (n \cdot \text{grad } H) \neq 0 \quad \mu\text{-f.ü.} \quad (M4.23)$$

auf Ω_j , dann ist $\sigma_{sc}(\tilde{L}) = \emptyset$.

Korollar M4.5. Das Spektrum von $\tilde{L}$ ist symmetrisch bezüglich der Null.

Lemma M4.6. Der Operator A sei selbstadjungiert mit Definitionsbereich $D(A) \subset \mathcal{X}$. Es existiere eine orthogonale Zerlegung von $\mathcal{X}$ in $\mathcal{X} = \bigoplus_{j \in I} \mathcal{X}_j$, derart daß A von $\mathcal{X}_j$ reduziert wird. (D.h.: P_j sei die orthogonale Projektion auf $\mathcal{X}_j$. $\mathcal{X}_j$ reduziert A genau dann, wenn $AP_j \supset P_j A$ oder wenn $e^{iAt} P_j = P_j e^{iAt}$ für alle $t \in \mathbb{R}$.) Dann ist $A|_{\mathcal{X}_j}$ auf $\mathcal{X}_j \cap D(A)$ selbstadjungiert und es gilt

$$\sigma_{pp}(A) = \bigcup_{j \in I} \sigma_{pp}(A|_{\mathcal{K}_j}) \quad , \quad (M4.24)$$

$$\sigma_c(A) = \overline{\bigcup_{j \in I} \sigma_c(A|_{\mathcal{K}_j})} \quad . \quad (M4.25)$$

Beweis: Siehe Reed/Simon Kap. VII [58].

Lemma M4.7. Sei $\Delta \subset \mathbb{R}^N$ meßbar, $\mu(\Delta) \neq 0$, $\mathcal{K} = \mathcal{L}^2(\Delta, d\mu)$ und $h: \Delta \rightarrow \mathbb{R}$ meßbar. Dann ist der Multiplikationsoperator

$$A: f(\cdot) \mapsto (hf)(\cdot) \quad (M4.26)$$

auf $D(A) = \{f \in \mathcal{K} \mid \|hf\| < \infty\}$ selbstadjungiert.

(i) Das Spektralmaß von A ist

$$\|E(B)f\|^2 = \int_{h^{-1}(B)} |f|^2 d\mu \quad . \quad (M4.27)$$

für jede Borelmenge $B \in \mathcal{L}(\mathbb{R})$.

(ii) Ist h stetig differenzierbar und $\text{grad } h \neq 0$ f.ü. auf Δ , dann ist das Spektrum von A absolut stetig.

(iii) Ist Δ offen und zusammenhängend und h stetig, $h \neq \text{const.}$ auf Δ , dann ist

$$\sigma_c(A) = \overline{\text{rng } h} \quad . \quad (M4.28)$$

Beweis: (i) und (ii) findet sich in Kato Kap. X, Beispiel 1.9, [31]. (iii) folgt direkt aus der Spektraldarstellung von A.

Beweis von Satz M4.4: Es ist $\mathcal{K} = \mathcal{L}^2(\bar{\Omega} \times \mathbb{T}^N) = \mathcal{L}^2(\bar{\Omega}) \otimes \mathcal{L}^2(\mathbb{T}^N)$.

Da $\mu(\Omega_j \cap \Omega_k) = 0$ für $j \neq k$ und $\bar{\Omega} = \bigcup_{j \in I} \Omega_j$ und da das Funktionensystem $\{e^{inw} \mid n \in \mathbb{Z}^N\}$ eine orthogonale Basis in $\mathcal{L}^2(\mathbb{T}^N)$ bildet, gilt

$$\mathcal{L}^2(\bar{\Omega} \times \mathbb{T}^N) = \bigoplus_{j \in I, n \in \mathbb{Z}^N} \mathcal{L}^2(\Omega_j) e^{inw} . \quad (\text{M4.29})$$

Sei $\mathcal{K}_j^{(n)} = \mathcal{L}^2(\Omega_j) e^{inw}$, $P_j^{(n)}$ die orthogonale Projektion auf $\mathcal{K}_j^{(n)}$ und

$$f(J, w) = \sum_{n \in \mathbb{Z}^N} f_n(J) e^{inw} \in \mathcal{L}^2(\bar{\Omega} \times \mathbb{T}^N) . \quad (\text{M4.30})$$

Dann ist mit $U(t) = e^{iLt}$, $L = i[H, \cdot]$,

$$U(t) P_j^{(n)} f(J, w) = \sum_{\Omega_j} f_n(J) e^{in(w + t \text{grad} H)} = P_j^{(n)} U(t) f(J, w) \quad (\text{M4.31})$$

für alle $t \in \mathbb{R}$. Für alle $n \in \mathbb{Z}^N$ und alle $j \in I$ wird also L von $\mathcal{K}_j^{(n)}$ reduziert.

Wir definieren eine unitäre Transformation

$$U: \mathcal{K}_j^{(n)} \rightarrow \mathcal{L}^2(\Omega_j) \text{ durch}$$

$$U: f(J) e^{inw} \mapsto f(J) (2\pi)^{N/2} \quad (\text{M4.32})$$

Für jedes $f \in \mathcal{L}^2(\Omega_j) \cap U D(L \upharpoonright \mathcal{K}_j^{(n)}) U^{-1}$ gilt dann

$$U(L \upharpoonright \mathcal{K}_j^{(n)}) U^{-1}: f(J) \mapsto (n \cdot \text{grad } H)(J) f(J) . \quad (\text{M4.33})$$

$L \upharpoonright \mathcal{K}_j^{(n)}$ ist also der Multiplikation mit $n \cdot \text{grad } H$ in $\mathcal{L}^2(\Omega_j)$ unitär äquivalent.

Sei $n \in M_j \cap \mathbb{Z}^N$. Dann ist nach (M4.3) $n \cdot \text{grad } H = c \in G_j$ auf Ω_j und somit

$$\sigma(L \upharpoonright \mathcal{K}_j^{(n)}) = \sigma_{pp}(L \upharpoonright \mathcal{K}_j^{(n)}) = \{c\} . \quad (\text{M4.34})$$

Nach (M4.24) ist also $\sigma_{pp}(L) \supset \bigcup_{j \in I} G_j$. Der Eigenwert c von $L \upharpoonright \mathcal{K}_j^{(n)}$ ist unendlichfach entartet, da $\dim \mathcal{L}^2(\Omega_j) = \infty$.

Sei $n \in (\mathbb{R}^N \setminus M_j) \cap \mathbb{Z}^N$. $E(B)$ sei das Spektralmaß von $U(L \upharpoonright \mathcal{K}_j^{(n)})U^{-1}$. Dann ist für jedes $f \in \mathcal{L}^2(\Omega_j)$ nach (M4.27)

$$\|E(\{\lambda\})f\|^2 = \int_{(\text{ngrad } H)^{-1}(\{\lambda\})} |f|^2 d\mu. \quad (\text{M4.35})$$

Nach (M4.4) ist $\mu((n \cdot \text{grad } H)^{-1}(\{\lambda\}) \cap \Omega_j) = 0$ für alle $\lambda \in \mathbb{R}$.

Also ist $\|E(\{\lambda\})f\|^2 = 0$ für alle $\lambda \in \mathbb{R}$ und alle $f \in \mathcal{L}^2(\Omega_j)$.

Das Spektrum von $L \upharpoonright \mathcal{K}_j^{(n)}$ ist somit rein stetig. Damit folgt

$$\sigma_{pp}(L) = \bigcup_{j \in I} G_j. \quad (\text{M4.36})$$

Nach (M4.25) gilt

$$\sigma_c(L) = \overline{\bigcup_{n \in \mathbb{Z}^N} \sigma_c(L \upharpoonright \mathcal{L}^2(\bar{\Omega})e^{inw})}, \quad (\text{M4.37})$$

wobei nach (M4.28) und (M4.33)

$$\sigma_c(L \upharpoonright \mathcal{L}^2(\bar{\Omega})e^{inw}) = \overline{\text{rng}(n \cdot \text{grad } H)}, \text{ falls } n \cdot \text{grad } H \neq \text{const. auf } \Omega.$$

Aus Lemma M4.7(ii) und (M4.33) folgt schließlich

$$\sigma_{sc}(L \upharpoonright \mathcal{K}_j^{(n)}) = \emptyset, \text{ falls } \text{grad } (n \cdot \text{grad } H) \neq 0 \text{ f.ä. auf } \Omega_j.$$

Damit sind die Behauptungen (i) bis (iv) für L nachgewiesen. Da nach (M4.2) L unitär äquivalent zu $\tilde{L}$ ist, gelten sie auch für $\tilde{L}$.

Beweis von Korollar M4.5: Das Spektrum der Multiplikation mit $h(\cdot)$ ist symmetrisch bezüglich der Null zu dem Spektrum der Multiplikation mit $-h(\cdot)$. Damit folgt Korollar M4.5, wenn man beachtet, daß $L \upharpoonright \mathcal{K}_j^{(n)}$ unitär äquivalent der Multiplikation mit

$n \cdot \text{grad } H$ in $\mathcal{X}^2(\Omega_j)$, $L|_{\mathcal{X}_j^{(-n)}}$ unitär äquivalent der Multiplikation mit $-n \cdot \text{grad } H$ in $\mathcal{X}^2(\Omega_j)$ und L unitär äquivalent zu $\tilde{L}$ ist.

M5. Beispiele zu Abschnitt M4

Zur Illustration der Ergebnisse aus Abschnitt M4 diskutieren wir einige Beispiele separierbarer Hamiltonscher Systeme. Die Aussagen über die Teile des Spektrums folgen aus Satz M4.4. Die Entartung des Spektrums bestimmt sich aus der Entartung der jeweiligen Multiplikationsoperatoren im Beweis zu Satz M4.4.

M5.1 Der harmonische Oszillator

Es sei

$$H_1: \{q, p\} \mapsto p_1^2 + p_2^2 + p_3^2 + a_1^2 q_1^2 + a_2^2 q_2^2 + a_3^2 q_3^2, \quad (M5.1)$$

$a_1, a_2, a_3 \neq 0$, auf $\bar{I}_1 = \mathbb{R}^6$ und $L_1 = i[H_1, \cdot]$. Dann ist mit $a = \{a_1, a_2, a_3\}$

$$\sigma_{pp}(L_1) = \{2na \mid n \in \mathbb{Z}^3\}, \quad \sigma_c(L_1) = \emptyset. \quad (M5.2)$$

Sind wenigstens zwei der drei Konstanten a_1, a_2, a_3 rational unabhängig, dann ist $\sigma_{pp}(L_1)$ ein dicht liegendes Punktspektrum:

$$\sigma(L_1) = \overline{\sigma_{pp}(L_1)} = \mathbb{R}.$$

M5.2 Potentialtopf

Es sei

$$H_2: \{q, p\} \mapsto p^2 + a^2 \tan^2 q, \quad (M5.3)$$

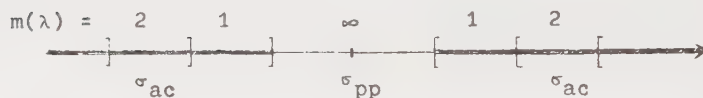
$a > 0$, auf $\overline{T}_2 = [-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}] \times \mathbb{R}$ und $L_2 = i[H_2, \cdot]$. Dann ist

$$\sigma_{pp}(L_2) = \{0\}, \quad \sigma_{ac}(L_2) =]-\infty, -\frac{a}{\pi}] \cup [\frac{a}{\pi}, \infty[,$$

$$\sigma_{sc}(L_2) = \emptyset ,$$

(M5.4)

$$m(\lambda) = \begin{cases} n & \text{für } \lambda < 0 \text{ und } -(n+1)\frac{a}{\pi} < \lambda \leq -n\frac{a}{\pi} \\ \infty & \text{für } \lambda = 0 \\ n & \text{für } \lambda > 0 \text{ und } n\frac{a}{\pi} \leq \lambda < (n+1)\frac{a}{\pi} \\ & \text{für } n = 1, 2, \dots \end{cases} \quad +)$$



Es sei

$$H_3: \{q, p\} \mapsto p^2 + \frac{1}{\pi^2 - 4q^2} \quad (M5.5)$$

auf $\overline{T}_2 = [-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}] \times \mathbb{R}$ und $L_3 = i[H_3, \cdot]$. Dann ist

$$\sigma_{pp}(L_3) = \{0\}, \quad \sigma_{ac}(L_3) =]-\infty, -\frac{2}{\pi^3}] \cup [\frac{2}{\pi^3}, \infty[,$$

$$\sigma_{sc}(L_3) = \emptyset ,$$

(M5.6)

$$m(\lambda) = \begin{cases} n & \text{für } \lambda < 0 \text{ und } -(n+1)\frac{2}{\pi^3} < \lambda \leq -n\frac{2}{\pi^3} \\ \infty & \text{für } \lambda = 0 \\ n & \text{für } \lambda > 0 \text{ und } n\frac{2}{\pi^3} \leq \lambda < (n+1)\frac{2}{\pi^3} \\ & \text{für } n = 1, 2, \dots \end{cases} .$$

Für $a = \frac{2}{\pi^2}$ ist das Spektrum von L_2 identisch mit dem von L_3 . L_2 und L_3 sind also unitär äquivalent. Wie man sich leicht

+) $m(\lambda)$ ist die Entartung des Spektrums im Punkt λ .

überzeugt, sind H_2 und H_3 allerdings nicht isomorph. Es gibt also keine kanonische Transformation $T: \Gamma_2 \rightarrow \Gamma_2$, so daß $H_2 \circ T = H_3$.

M5.3 Das Kepler-Problem

Es sei

$$H: \{\vec{q}, \vec{p}\} \mapsto \frac{1}{2m} \vec{p}^2 - \frac{k}{|\vec{q}|}, \quad (M5.7)$$

$k > 0$, auf $\bar{\Gamma} = \mathbb{R}^6$ und $L = i[H, \cdot]$. (Der Phasenraum Γ ist $\mathbb{R}^6$ mit Ausnahme der Hyperfläche $H(q, p) = 0$ und den Stoßbahnen: $\{\{\vec{q}, \vec{p}\} \in \mathbb{R}^6 \mid \vec{q} \times \vec{p} = 0\}$. Als Menge vom Maß Null sind sie für die spektralen Eigenschaften von L unwichtig.)

Nach Abschnitt 2.3 zerfällt Γ in einen "gebundenen Anteil" Γ_1 und einen "Streuanteil" Γ_2 . Es ist

$$\begin{aligned} \bar{\Gamma}_1 &= \{\{\vec{q}, \vec{p}\} \in \mathbb{R}^6 \mid H(\vec{q}, \vec{p}) \leq 0\} \\ \bar{\Gamma}_2 &= \{\{\vec{q}, \vec{p}\} \in \mathbb{R}^6 \mid H(\vec{q}, \vec{p}) > 0\} \end{aligned} \quad (M5.8)$$

H eingeschränkt auf $\bar{\Gamma}_1$ transformiert sich zu

$$H_1': \{J, w\} \mapsto - \frac{2\pi^2 m k^2}{(J_1 + J_2 + J_3)^2} \quad (M5.9)$$

auf $\bar{\Gamma}_1' = \bar{\Omega} \times T^3$ mit geeignetem $\bar{\Omega} \in \mathbb{R}^3$. Damit ist

$$\begin{aligned} \sigma_{pp}(L \upharpoonright \mathcal{L}^2(\bar{\Gamma}_1)) &= \{0\}, \quad \sigma_{sc}(L \upharpoonright \mathcal{L}^2(\bar{\Gamma}_1)) = \emptyset, \\ \sigma_{ac}(L \upharpoonright \mathcal{L}^2(\bar{\Gamma}_1)) &= \mathbb{R}, \quad m(\lambda) = \infty \quad \text{für alle } \lambda \in \mathbb{R}. \end{aligned} \quad (M5.10)$$

Um das Spektrum von $L \upharpoonright \mathcal{L}^2(\bar{\Gamma}_2)$ zu bestimmen, sei

$W(r, \theta, \phi, E, \alpha_\theta, \alpha_\phi)$ ein vollständiges Integral der Hamilton-Jacobischen partiellen Differentialgleichung auf $\bar{\Gamma}_2$.

(Dies existiert im Fall des Kepler-Problems global.) Mit

$\beta_E = \frac{\partial W}{\partial E}$, $\beta_\theta = \frac{\partial W}{\partial \alpha_\theta}$ und $\beta_\phi = \frac{\partial W}{\partial \alpha_\phi}$ definieren $(E, \alpha_\theta, \alpha_\phi, \beta_E, \beta_\theta, \beta_\phi)$ einen neuen Satz kanonischer Variablen, in denen sich H eingeschränkt auf $\bar{\Gamma}_2$ transformiert zu

$$H_2': \{E, \alpha_\theta, \alpha_\phi, \beta_E, \beta_\theta, \beta_\phi\} \mapsto E \quad . \quad (M5.11)$$

Also ist $L_2' = i[H_2', \cdot] = i \frac{\partial}{\partial \beta_E}$ in $\mathcal{L}^2(\Delta)$ mit $\Delta \subset \mathbb{R}^6$. Da β_E für jeden Punkt $\{E, \alpha_\theta, \alpha_\phi, \beta_\theta, \beta_\phi\} \in \mathbb{R}^5$ Werte aus ganz $\mathbb{R}$ annimmt, ist das Spektrum von $L \upharpoonright \mathcal{L}^2(\bar{\Gamma}_2)$:

$$\begin{aligned} \sigma_{pp}(L \upharpoonright \mathcal{L}^2(\bar{\Gamma}_2)) &= \emptyset = \sigma_{sc}(L \upharpoonright \mathcal{L}^2(\bar{\Gamma}_2)) \quad , \\ \sigma_{ac}(L \upharpoonright \mathcal{L}^2(\bar{\Gamma}_2)) &= \mathbb{R} \quad , \quad m(\lambda) = \infty \quad \text{für alle } \lambda \in \mathbb{R}. \end{aligned} \quad (M5.12)$$

Das Spektrum von L ist demnach wie (M5.10).

M5.4 Ergodische Komponenten

Das folgende Beispiel dient der Illustration der Abschnitte 4.2 und 4.3. Es sei

$$H_4: \{J, w\} \mapsto \frac{1}{2}(J_1^2 + J_2^2) \quad (M5.13)$$

auf $\Gamma_4 = \mathbb{R}^2 \times T^2$ und $L_4 = i[H_4, \cdot]$. Dann ist

$$\begin{aligned} \sigma_{pp}(L_4) &= \{0\} \quad , \quad \sigma_{ac}(L_4) = \mathbb{R} \quad , \\ \sigma_{sc}(L_4) &= \emptyset \quad , \quad m(\lambda) = \infty \quad \text{für alle } \lambda \in \mathbb{R}. \end{aligned} \quad (M5.14)$$

Die Energieflächen sind $J^0 \times T^2$, $J^0 \in \mathbb{R}^2$.

Bei der Bestimmung der ergodischen Komponenten des Hamiltonschen Systems zu H_4 müssen zwei Fälle unterschieden werden.

- a) J_1^0 und J_2^0 seien rational unabhängig. Dann ist die Energiefläche $J^0 \times T^2$ eine ergodische Komponente mit dem auf ihr konzentrierten zweidimensionalen Lebesguemaß als invariantem Maß.
- b) J_1^0 und J_2^0 seien rational abhängig, also $nJ = 0$ für ein $0 \neq n \in \mathbb{Z}^2$. Dann ist jede der Mengen

$$\{(J, w) \in J^0 \times T^2 \mid nw = \text{const.}\} \quad (M5.15)$$

eine ergodische Komponente. Das invariante Maß ist das auf dieser Menge konzentrierte eindimensionale Lebesguemaß.

Alle ergodischen Komponenten sind also in diesem Beispiel nur ergodisch. Das Spektrum von L_4 ist aber bis auf die Null absolut stetig.

Die Menge der nichtergodischen Energieflächen ist eine Menge vom Maß Null. Die nichtergodischen Energieflächen liegen aber dicht in Γ_4 .

In ähnlicher Weise könnten wir bei beliebigen separierbaren Hamiltonschen Systemen die Zerlegung in ergodische Komponenten durchführen.

M6. Spektrale Eigenschaften von Liouvilleoperatoren

(der allgemeine Fall)

Bei beliebigen Liouvilleoperatoren läßt sich zumindestens das Punktspektrum noch einigermaßen vollständig charakterisieren. Es gilt:

Satz M6.1. Sei (Γ, μ, T_t) ein Hamiltonsches System mit Hamiltonfunktion H und Liouvilleoperator L . Dann gilt:

- (i) Jeder Eigenwert von L ist unendlichfach entartet.
- (ii) Das Punktspektrum von L ist die Vereinigung von abzählbar vielen additiven Gruppen.

Korollar M6.2. (i) $\sigma_{pp}(L)$ ist symmetrisch bezüglich der Null.
 (ii) Enthält $\sigma_{pp}(L)$ nicht die Null, dann ist das Spektrum von L rein stetig.

Beweis: ad(i): f sei eine Eigenfunktion von L . Es gilt also

$$f \circ T_t = e^{i\lambda t} f \text{ f.ü.. Dann ist } |f| \circ T_t = |f|, \text{ also } |f| \in P_0 \mathcal{X}.$$

Nach Lemma M3.3 und M3.6 und wegen $\|f\| \neq 0$ existiert eine beschränkte und invariante Menge $\Delta \subset \Gamma$, $\mu(\Delta) \neq 0$, so daß $f \neq 0$ f.ü. auf Δ und $H \in \mathcal{L}^2(\Delta, d\mu)$.

(a) Sei $\text{grad } H \neq 0$ f.ü. auf Δ . Dann gilt für jede meßbare Funktion $g: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$, die bezüglich des Bildmaßes $(H|_{\Delta})(\mu)$ quadratintegrabel ist,

$$\int_{\Delta} |g \circ H|^2 d\mu = \int_{\mathbb{R}} |g|^2 d(H|_{\Delta})(\mu) < \infty. \quad (\text{M6.1})$$

Die Abbildung

$$U: g \circ H \mapsto g$$

(M6.2)

ist somit eine partielle Isometrie von $P_0 \mathcal{L}^2(\Delta, d\mu)$ auf $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}, d(H|_{\Delta})(\mu))$. Da $\text{grad } H \neq 0$ f.ü., hat der Träger des Maßes $(H|_{\Delta})(\mu)$ ein von Null verschiedenes Lebesguemaß. $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}, d(H|_{\Delta})(\mu))$ und somit $P_0 \mathcal{L}^2(\Delta, d\mu)$ ist also unendlichdimensional.

(b) Sei $\text{grad } H = 0$ auf $\Delta_1 \subset \Delta$ mit $\mu(\Delta_1) \neq 0$. Dann ist $L|_{\mathcal{L}^2(\Delta_1, d\mu)} = 0$, also $\mathcal{L}^2(\Delta_1, d\mu) \subset P_0 \mathcal{L}^2(\Delta, d\mu)$. Somit ist auch in diesem Fall $P_0 \mathcal{L}^2(\Delta, d\mu)$ unendlich dimensional.

Man definiere

$$h = \begin{cases} \frac{f}{|f|} g & \text{auf } \Delta \text{ mit } g \in P_0 \mathcal{L}^2(\Delta, d\mu) \\ 0 & \text{auf } \bar{\Gamma} \setminus \Delta \end{cases} \quad (\text{M6.3})$$

Dann ist $\|h\| < \infty$ und $h \circ T_t = e^{i\lambda t} h$ f.ü.. Der Eigenwert λ ist somit unendlichfach entartet.

ad(ii): Es sei $\sigma_{pp}(L) = \{\lambda_j \in \mathbb{R} \mid j \in I\}$. Der Eigenraum zum Eigenwert λ_j werde von den linear unabhängigen Eigenfunktionen $f_j^{(k)}$, $k \in \mathbb{N}$, aufgespannt. Man definiere

$$\Delta_j^{(k)} = \{x \in \bar{\Gamma} \mid f_j^{(k)}(x) \neq 0\}, \quad \Delta_j = \bigcup_{k \in \mathbb{N}} \Delta_j^{(k)} \quad (\text{M6.4})$$

Dann ist Δ_j maximal in folgendem Sinne. (a) Es existiert eine Eigenfunktion f_j zum Eigenwert λ_j mit $f_j \neq 0$ f.ü. auf Δ_j .

(b) Für jede Eigenfunktion f zum Eigenwert λ_j gilt, daß

$$f = 0 \text{ f.ü. auf } \bar{\Gamma} \setminus \Delta_j.$$

Aus $f_j \circ T_t = e^{i\lambda_j t} f_j$ f.ü. folgt

$$|f_j| \circ T_t = |f_j \circ T_t| = |f_j| \quad . \quad (M6.5)$$

Für alle $j \in I$ ist also $|f_j| \in P_0 \mathbb{K}$ und Δ_j f.ü. invariant.

Wir zerlegen nun die Menge $\{\Delta_j | j \in I\}$ bezüglich des Maßes μ in Äquivalenzklassen (Δ_{j_1} äquivalent zu Δ_{j_2} genau dann, wenn $\Delta_{j_1} = \Delta_{j_2}$ f.ü., $j_1, j_2 \in I$) mit Repräsentanten $\Delta^{(1)}$, $1 \in I_1$. Gilt $\Delta_j \supset \Delta^{(1)}$ f.ü., $j \in I$, $1 \in I_1$, dann sei $\lambda_j \in G_1 \subset \sigma_{pp}(L)$.

Wir behaupten nun, daß G_1 eine additive Gruppe ist. Dazu sei $\lambda_{j_1}, \lambda_{j_2} \in G_1$, $j_1, j_2 \in I$. Nach Definition von G_1 gilt dann $\Delta_{j_1} \supset \Delta^{(1)}$ f.ü. und $\Delta_{j_2} \supset \Delta^{(1)}$ f.ü.. Man definiere

$$f_{\pm} = \begin{cases} \frac{f_{j_1}}{|f_{j_1}|} f_{j_2} & \text{bzw.} \quad \frac{f_{j_1}}{|f_{j_1}|} f_{j_2}^* \quad \text{auf} \quad \Delta_{j_1} \\ 0 & \text{auf} \quad \bar{I} \setminus \Delta_{j_1} \end{cases} \quad (M6.6)$$

Dann gilt $0 < \|f_{\pm}\| < \infty$ und

$$f_{\pm} \circ T_t = e^{i(\lambda_{j_1} \pm \lambda_{j_2})t} f_{\pm} \quad \text{f.ü.} \quad . \quad (M6.7)$$

Also ist $\lambda_{j_1} \pm \lambda_{j_2} = \lambda_{j_{\pm}} \in \sigma_{pp}(L)$, $j_{+}, j_{-} \in I$. Da

$\Delta_{j_{\pm}} \supset \Delta_{j_1} \cap \Delta_{j_2} \supset \Delta^{(1)}$ f.ü., ist $\lambda_{j_1} \pm \lambda_{j_2} \in G_1$. Also gilt

$$\sigma_{pp}(L) = \bigcup_{j \in I} \lambda_j = \bigcup_{1 \in I_1} G_1 \quad . \quad (M6.8)$$

Anhang 1

(a) Wir ergänzen die Definitionen in Abschnitt 2.1.

Sei $\{q, p\} = x \in \mathbb{R}^{2N}$. Die Poissonklammer zweier Funktionen $f, g \in C^1(\Gamma, \mathbb{C})$ ist definiert als

$$[f, g] = \sum_{j=1}^N \frac{\partial f}{\partial q_j} \frac{\partial g}{\partial p_j} - \frac{\partial f}{\partial p_j} \frac{\partial g}{\partial q_j} \quad . \quad (A1.1)$$

$[\cdot, \cdot]$ ist antisymmetrisch, linear in beiden Faktoren und erfüllt die Jacobi-Identität.

Eine kanonische Transformation T ist eine zweimal stetig differenzierbare, bijektive Abbildung $T: \Delta \rightarrow \Delta'$, $\Delta, \Delta' \subset \mathbb{R}^{2N}$, $\{q, p\} = x \in \Delta$, $\{q', p'\} \in \Delta'$, so daß für alle $x \in \Delta$ gilt

$$\begin{aligned} [q_j^1(x), q_k^1(x)] &= 0 \\ [q_j^1(x), p_k^1(x)] &= \delta_{jk} \\ [p_j^1(x), p_k^1(x)] &= 0 \end{aligned} \quad , \quad (A1.2)$$

$j, k = 1, \dots, N$. Dies ist die Invarianz der fundamentalen Poissonklammern. Die Determinante der Jacobischen Matrix einer kanonischen Transformation ist gleich eins. Kanonische Transformationen erhalten also das Lebesguesche Maß μ . Die kanonischen Transformationen bilden eine Gruppe (bzgl. der Komposition). Sie lassen die Poissonklammern invariant: $[f \circ T, g \circ T] = [f, g] \circ T$.

(b) Lemma A1.1 (Hunziker). Sei (Γ, μ, T_t) ein Hamiltonsches System mit Hamiltonfunktion H und Liouvilleoperator L . Dann ist L der Abschluß des Operators $i[H, \cdot]$ definiert auf $C_0^1(\Gamma)$.

(c) Definition A1.2. Sei λ das Lebesguesche Maß auf $\mathbb{R}$. Eine meßbare Menge $B \subset [0, \infty[$ heißt von der Dichte Null, wenn gilt

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \lambda(B \cap [0, t]) = 0. \quad (\text{A1.3})$$

(d) Definition A1.3. Sei (Γ, μ, T_t) ein Hamiltonsches System und $\Delta \subset \Gamma$ invariant und kompakt. Ein Punkt $x \in \Delta$ heißt quasi-regulär (bezüglich T_t), wenn für alle $f \in C(\Delta)$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t (f \circ T_s)(x) ds = \int_{\Delta} f d\mu_x \quad (\text{A1.4})$$

existiert. (Der Grenzwert definiert dann das Maß μ_x .) Ein quasi-regulärer Punkt x heißt ergodisch, wenn μ_x ergodisch ist. Ein quasiregulärer Punkt x heißt dicht, wenn für jede Umgebung U von x $\mu_x(U) > 0$. Ein Punkt $x \in \Delta$ heißt regulär, wenn er quasiregulär, ergodisch und dicht ist.

Satz A1.4. Bezüglich jedes invarianten Maßes sind fast alle Punkte $x \in \Delta$ regulär.

Siehe [29, S. 106].

(e) Eine freie additive Gruppe $G \subset \mathbb{R}$ mit Rang N hat die Form

$$G = \{ \vec{n} \cdot \vec{\lambda} \mid \vec{n} \in \mathbb{Z}^N \}. \quad (\text{A1.5})$$

Dabei sind die Komponenten $\lambda_1, \dots, \lambda_N$ des Vektors $\vec{\lambda}$ rational unabhängig, d.h. aus $\vec{n} \cdot \vec{\lambda} = 0$ folgt $\vec{n} = 0$.

Siehe [38, S. 115].

Anhang 2

Lemma A2.1. Sei (Γ, μ, T_t) ein Hamiltonsches System mit nur gebundenen Zuständen, Hamiltonfunktion H und ergodischen Komponenten $(\Delta(j), \nu(j), T_t)$, $j \in I \subset [0, 1]$. H sei die einzige Konstante der Bewegung und $\delta(H - c)$ das mikrokanonische Ensemble auf der Energiefläche $E_c = \{x \in \Gamma \mid H(x) = c \in \mathbb{R}\}$. Dann gilt bis auf eine μ -Nullmenge

$$(E_c, \delta(H - c), T_t) = (\Delta(j(c)), \nu(j(c)), T_t) \quad (A2.1)$$

mit geeignetem $j(c) \in I$ für alle $c \in \text{rng } H$.

Beweis: Nach Konstruktion der ergodischen Komponenten existiert die meßbare Funktion

$$f: x \in \Delta(j) \mapsto j \quad (A2.2)$$

f ist Konstante der Bewegung. Nach Voraussetzung existiert also eine meßbare Funktion $g: \mathbb{R} \rightarrow I$, so daß

$$f = g \circ H \quad \text{f.ü.} \quad (A2.3)$$

a) Sei $f(x) = g \circ H(x)$ $\delta(H - c)$ -f.ü. auf E_c . Angenommen $(E_c, \delta(H - c), T_t)$ sei nicht ergodisch. Dann existiert eine Zerlegung von E_c in zwei f.ü. invariante Mengen E'_c und E''_c mit $\delta(H - c)(E'_c) \neq 0 \neq \delta(H - c)(E''_c)$. f nimmt auf E'_c und E''_c verschiedene Werte an. Also ist $f(x) \neq g \circ H(x)$ auf einer Menge von positivem $\delta(H - c)$ -Maß. Dies ist ein Widerspruch. Also ist

$(E_c, \delta(H - c), T_t)$ ergodisch. Da E_c der Träger von $\delta(H - c)$ ist, ist f auf E_c konstant. Somit ist $f(x) = g \circ H(x)$ auf E_c .

b) Sei $A = \{x \in \Gamma \mid f(x) \neq g \circ H(x)\}$, $\Omega = \{E_c \mid E_c \cap A \neq \emptyset\}$ und $H(\Omega) = B \subset \mathbb{R}$. Nach Voraussetzung ist $\mu(\Delta) = 0$. Nach a) ist Ω die Menge der nichtergodischen Energieflächen. Dann gilt mit [9, S.41]

$$0 = \int_{\Gamma} \chi_{\Delta} d\mu = \int_{\mathbb{R}} \int_{\{H=c\}} \chi_{\Delta} \delta(H - c) dc = \int_B \delta(H - c)(\Delta) dc. \quad (A2.4)$$

- . Da nach a) $\delta(H - c)(\Delta) > 0$ auf B , muß B eine Lebesguenullmenge sein. Da H die einzige Konstante der Bewegung ist, ist $\text{grad } H \neq 0$ f.ü. und somit $\mu(H^{-1}(B)) = \mu(\Omega) = 0$ (vgl. Lemma M4.7). Die Menge der Energieflächen, die keine ergodische Komponente sind, bilden also eine Menge vom μ -Maße Null.

Anhang 3

ad 7.1. Wir zeigen die Abschätzung (7.10) für

$$H(q, p) = H_1(q_1, p_1) + H_2(q_2, p_2) = \frac{1}{2m}(p_1^2 + p_2^2) + W(q_1) + W(q_2). \quad (A3.1)$$

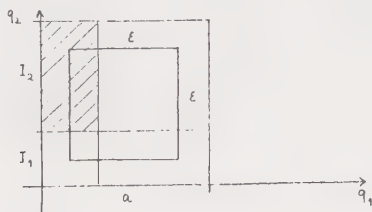
Die Verallgemeinerung auf $3N$ Koordinaten folgt dann unmittelbar.

Wir zerlegen den Ortsraum $[0, a]$ in die beiden Intervalle I_1 und I_2 . Dann ist

$$\begin{aligned} P_0 \rho(0) &= \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t \rho(0) T_{-s} ds \\ &= \frac{1}{Z} e^{-\beta H} \left(\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t (\chi_1 \chi_2) \circ T_{-s} ds \right) = \frac{1}{Z} e^{-\beta H} f(H_1, H_2). \end{aligned} \quad (A3.2)$$

Dabei ist nach Definition $\chi_1 \chi_2$ die charakteristische Funktion einer der vier Mengen $I_1^2 \times R^2$, $I_1 \times I_2 \times R^2$, $I_2 \times I_1 \times R^2$ oder $I_2^2 \times R^2$.

$\chi_1 \chi_2$ sei etwa die charakteristische Funktion von $I_1 \times I_2 \times R^2$. Nach (A3.2) müssen wir ihr zeitliches Mittel abschätzen.



Nach Voraussetzung über W ist $f(H_1, H_2)$ auf $[\epsilon, a - \epsilon]^2 \times R^2$ f.ü. eine Funktion von p_1^2 und p_2^2 . Für festes p_1, p_2 ist also f auf $[\epsilon, a - \epsilon]^2$ f.ü. konstant. Zur Abschätzung nach oben sei

$f(p_1, p_2) = 0$ auf dem ϵ -Rand. Dann ist

$$f(p_1, p_2) \leq \frac{l(I_1)l(I_2)}{(a - 2\epsilon)^2} \leq \frac{(l(I_1) + 2\epsilon)(l(I_2) + 2\epsilon)}{a^2} \text{ f.ü.} \quad (A3.3)$$

auf $[\varepsilon, a - \varepsilon]^2$. Zur Abschätzung nach unten wird der positive Beitrag des ε -Randes vernachlässigt. Dann ist

$$\frac{(1(I_1) - \varepsilon)(1(I_2) - \varepsilon)}{a^2} \leq \frac{(1(I_1) - \varepsilon)(1(I_2) - \varepsilon)}{(a - 2\varepsilon)^2} \leq f(p_1, p_2) \quad (A3.4)$$

f.ü. auf $[\varepsilon, a - \varepsilon]^2$.

ad 7.2. Da H nach Voraussetzung die einzige Konstante der Bewegung ist, gilt

$$P_0 \rho = \frac{1}{\Omega(E)} \frac{d}{dE} \int_{\{H \leq E\}} \rho \, d^{3N}q d^{3N}p \quad . \quad (A3.5)$$

Dabei ist $\Omega(E)$ die Strukturfunktion des Systems (Chintschin [9])

$$\Omega(E) = \frac{d}{dE} \int_{\{H \leq E\}} d^{3N}q d^{3N}p \quad . \quad (A3.6)$$

Damit ergibt sich (7.17) durch

$$\begin{aligned} P_0 \rho(0) &= \frac{1}{\Omega(E)} \frac{d}{dE} \int_{\{H \leq E\}} \rho(0) d^{3N}q d^{3N}p \\ &= \frac{1}{\Omega(E)} \frac{d}{dE} \int_{\{H \leq E\}} \prod_{j=1}^M \frac{\delta(H_j - E_j)}{\Omega(E_j)} d^{3N}p \int_{[0, a]}^{3N} \prod_{j=1}^M \frac{1}{z_j} \zeta_j d^{3N}q \\ &= \frac{1}{\Omega(E)} \frac{d}{dE} \int_{\{H \leq E\}} \prod_{j=1}^M \frac{\delta(H_j - E_j)}{\Omega(E_j)} \Omega(H_j) dH_j \quad (A3.7) \\ &= \frac{1}{\Omega(E)} \frac{d}{dE} \int_0^E \int_0^{E-H_1} \dots \int_0^{E-\sum H_j} \prod_{j=1}^M \frac{\delta(H_j - E_j)}{\Omega(E_j)} \Omega(H_j) dH_j \\ &= \frac{1}{\Omega(E)} \frac{d}{dE} \begin{cases} 1 & \text{für } E > \sum_{j=1}^M E_j \\ 0 & \text{für } E < \sum_{j=1}^M E_j \end{cases} = \frac{1}{\Omega(E)} \delta(E - \sum_{j=1}^M E_j) \quad . \end{aligned}$$

Anhang 4

Beweis von Satz 8.1: Es sei $\Delta = \{x \in \Gamma \mid (P_O \rho)(x) > 0\}$. Nach Lemma M3.3 existiert eine Zerlegung von Δ in f.ü. invariante Mengen Δ_n , $n \in I$, so daß $1, \rho, P_O \rho, \ln P_O \rho \in \mathcal{L}^2(\Delta_n, d\mu)$ für alle $n \in I$. Wir weisen die Abschätzung (8.3) für Integration über jedes Δ_n nach. Dann gilt (8.3) auch für Integration über Δ und, da auf $\Gamma \setminus \Delta$ $\rho = 0$ f.ü. und $P_O \rho = 0$, somit auch für Integration über Γ .

Es ist $\rho = P_O \rho + (1 - P_O)\rho$. Da $P_O \rho > 0$, gilt für alle $x \in \Delta_n$ mit $\rho(x) \neq 0$

$$\frac{(1 - P_O) \rho(x)}{\rho(x)} < 1. \quad (A4.1)$$

Also ist

$$\begin{aligned} \int_{\Delta_n} (P_O \rho) \ln(P_O \rho) d\mu &= \langle \rho | \ln P_O \rho \rangle = \int_{\Delta_n, \{\rho \neq 0\}} \rho \ln \left(\rho \left(1 - \frac{(1 - P_O)\rho}{\rho} \right) \right) d\mu \\ &= \int_{\Delta_n} \rho \ln \rho d\mu + \int_{\Delta_n, \{\rho \neq 0\}} \rho \ln \left(1 - \frac{(1 - P_O)\rho}{\rho} \right) d\mu. \quad (A4.2) \end{aligned}$$

Mit der Abschätzung $\ln(1 - x) \leq -x$ für $x < 1$ und (A4.1) folgt

$$\begin{aligned} \int_{\Delta_n} (P_O \rho) \ln(P_O \rho) d\mu &\leq \int_{\Delta_n} \rho \ln \rho d\mu - \int_{\Delta_n, \{\rho \neq 0\}} \rho \frac{(1 - P_O)\rho}{\rho} d\mu \\ &= \int_{\Delta_n} \rho \ln \rho d\mu - \langle 1 | (1 - P_O)\rho \rangle = \int_{\Delta_n} \rho \ln \rho d\mu. \quad (A4.3) \end{aligned}$$

Dabei gilt die Gleichheit genau dann, wenn $\frac{(1 - P_O)\rho}{\rho} = 0$ f.ü. auf $\{x \in \Delta_n \mid \rho(x) \neq 0\}$, also wenn $P_O \rho = \rho$.

Verzeichnis der mathematischen Symbole

---	topologischer Abschluß
$\rightarrow$	Vektor
$\times$	kartesisches Produkt (Produkt von Maßen, Kreuzprodukt)
$[\cdot, \cdot]$	Poissonklammer (Kommutator in M_1)
$\langle \mid \rangle$	Skalarprodukt
$\ \mid$	Norm
$\ \mid_2$	$\mathcal{T}_2$ -Norm
$*$	adjungiert (komplex konjugiert)
$\oplus$	direkte Summe
$\otimes$	direktes Produkt
$\upharpoonright$	eingeschränkt auf
$\mathcal{B}(\Gamma)$	Borelmengen von Γ
$\mathbb{C}$	Menge der komplexen Zahlen
$C(\Gamma)$	Menge der stetigen Funktionen
$C^k(\Gamma)$	k-mal stetig differenzierbaren Funktionen
$C^1_0(\Gamma)$	stetig differenzierbaren Funktionen mit kompakten Träger
card	Kardinalität
$D(A)$	Definitionsbereich des Operators A
dim	Dimension
f.ü.	fast überall
grad	Gradient
$\mathcal{H}$	Hilbertraum
I	Indexmenge
$\mathcal{L}^2(\Gamma, d\mu)$	Hilbertraum der quadratintegrablen Funktionen auf ($\Gamma, \mathcal{G}(\Gamma), \mu$)
$\mathcal{L}(\mathcal{H})$	Menge der beschränkten Operatoren auf $\mathcal{H}$

auf Γ

$m(\lambda)$	Entartung des Spektrums im Punkt λ
min	Minimum
$\mathbb{N}$	Menge der positiven ganzen Zahlen
$\mathbb{R}$	Menge der reellen Zahlen
rng	Wertebereich
s-lim	starker Limes
supp	Träger
$\mathcal{T}_1$	Menge der Spurklasseoperatoren
$\mathcal{T}_2$	Menge der Hilbert-Schmidt-Operatoren
tr	Spur
w-lim	schwacher Limes
$\mathbb{Z}$	Menge der ganzen Zahlen
χ_Δ	charakteristische Funktion (Indikatorfunktion) der Menge Δ
$\sigma(A)$	das Spektrum
$\sigma_{pp}(A)$	reines Punktspektrum
$\sigma_c(A)$	der stetige Teil des Spektrums
$\sigma_{sc}(A)$	der singulär stetige Teil des Spektrums
$\sigma_{ac}(A)$	der absolut stetige Teil des Spektrums
	des selbstadjungierten Operators A

Literaturverzeichnis

- [1] Abraham, R., Marsden, J.E.: Foundations of Mechanics.
Reading, Mass.: W.A. Benjamin 1967
- [2] Arnold, V.I.: Russian Math. Surveys 18, 9 (1963)
- [3] Arnold, V.I., Avez, A.: Ergodic Problems of Classical Mechanics. New York: W.A. Benjamin 1968
- [4] Avez, A.: C. R. Acad. Sc. Paris 264A, 49 (1967)
- [5] Bauer, H.: Wahrscheinlichkeitstheorie und Grundzüge der Maßtheorie. Berlin: de Gruyter 1968
- [6] Bocchieri, P., Loinger, A.: Phys. Rev. 107, 337 (1957)
- [7] Born, M.: Kgl. Danske Videnskab. Selskab. Mat.-Fys. Medd. 30, nr. 2 (1955)
- [8] Brioullin, L.: Scientific Uncertainty and Information.
New York: Academic Press 1964
- [9] Chintschin, A.J.: Mathematische Grundlagen der statistischen Mechanik. Mannheim: Bibliographisches Institut
Bd. 58/58a 1964
- [10] Cook, J.M.: Banach Algebras and Asymptotic Mechanics. In: Cargèse Lectures in Theoretical Physics 1965, ed. F. Lurçat. New York: Gordon and Breach 1967
- [11] Dorfman, J.R.: Kinetic and Hydrodynamic Theory of Time Dependent Correlation Functions. In: Proceedings of the International Summer School on Fundamental Problems in Statistical Mechanics III, Wageningen, 1974.
Amsterdam: North-Holland to appear
- [12] Ehrenfest, P. und T.: Begriffliche Grundlagen der statistischen Auffassung in der Mechanik. In: P. Ehrenfest, Collected Scientific Papers, ed. M.J. Klein.
Amsterdam: North-Holland 1959
- [13] Emch, G.G.: J. Math. Phys. 7, 1413 (1966)

- [14] Farquhar, I.E.: Ergodicity and Related Topics. In: Irreversibility in the Many-Body Problem, ed. J. Biel, J. Rae. New York: Plenum Press 1972
- [15] Ford, J.: Stochastic Behavior in Non-Linear Oscillator Systems. In: Lectures in Statistical Physics, ed. W.C. Schieve, J.S. Turner. Berlin: Springer 1974 (Springer Lecture Notes in Physics Nr. 28)
- [16] Frisch, H.L.: Phys. Rev. 109, 22 (1958)
- [17] Fues, E.: Störungsrechnung. In: Handbuch der Physik Band V. Berlin: Springer 1927
- [18] Gibbs, J.W.: Elementary Principles in Statistical Mechanics. New Haven: Yale University Press 1902. Deutsche Übersetzung: Zermelo, E.: Elementare Grundlagen der statistischen Mechanik. Leipzig: Verlag von Johann Ambrosius Barth 1905.
- [19] Golden, S. Longuet-Higgins, H.C.: Journ. Chem. Phys. 33, 1479 (1960)
- [20] Grad, H.: Levels of Description in Statistical Mechanics and Thermodynamics. In: Studies in the Foundations Methodology and Philosophy of Science Vol. 1, ed. M. Bunge. Berlin: Springer 1967
- [21] ter Haar, D.: Rev. Mod. Phys. 27, 289 (1957)
- [22] Halmos, P.R.: Lectures on Ergodic Theory. New-York: Chelsea 1956
- [23] Hobson, A.: Concepts in Statistical Mechanics. New-York: Gordon and Breach 1971
- [24] Hobson, A., Loomis, D.N.: Phys. Rev. 173, 285 (1968)
- [25] Hopf, E.: Math. Ann. 103, 710 (1930)
- [26] ——— Proc. Nat. Acad. Sci. USA 18, 333 (1932)
- [27] ——— Ergodentheorie. Berlin: Springer 1937 (Reprint 1970)
- [28] Hunziker, W.: Comm. math. Phys. 8, 282 (1968)
- [29] Jacobs, K.: Neuere Methoden und Ergebnisse der Ergodentheorie. Berlin: Springer 1960

- [30] Jancel, R.: Foundations of Classical and Quantum Statistical Mechanics. Oxford: Pergamon Press 1969
- [31] Kato, T.: Perturbation Theory for Linear Operators. Berlin: Springer 1966
- [32] Kolmogoroff, A.N.: Proceedings of the 1954 International Congress of Mathematicians. Amsterdam: North-Holland 1957. Englische Übersetzung in [1] Appendix D
- [33] — Dokl. Akad. Nauk. SSSR 98, 527 (1954)
- [34] Koopman, B.O.: Proc. Nat. Acad. Sci. USA 17, 315 (1931)
- [35] Koopman, B.O., von Neumann, J.: Proc. Nat. Acad. Sci. USA 18, 255 (1932)
- [36] Kroò, J.: Ann. Phys. 34, 907 (1911)
- [37] Kryloff, N., Bogoliouboff, N.: Ann. of Math. 38, 65 (1937)
- [38] Kurosch, A.G.: Gruppentheorie I. Berlin: Akademie-Verlag 1970
- [39] Lanz, L., Lugiato, L.A., Ramella, G.: Pysica 54, 94 (1971)
- [40] Lebowitz, J.L.: Hamiltonian Flows and Rigorous Results in Nonequilibrium Statistical Mechanics. In: Statistical Mechanics. New Concepts, New Problems, New Applications, ed. S.A. Rice, K.F. Freed, J.C. Light. Chicago: The University of Chicago Press 1972
- [41] Lebowitz, J.L., Penrose, O.: Phys. Today, 26, 2/26 (1973)
- [42] Lewis, R.M.: Arch. Rat. Mech. Anal. 5, 24 (1960)
- [43] Lorentz, H.A.: Abhandlungen über theoretische Physik, Band I. Leipzig: B.G. Teubner 1906
- [44] Loschmidt, J.: Wien. Ber. 73, 139 (1876)
- [45] Moser, J.: Nachr. Akad. Wiss. Göttingen Math. Phys. Klasse II, 1 (1962)
- [46] von Neumann, J.: Proc. Nat. Acad. Sci. USA 18, 70 (1932)
- [47] — Ann. of Math. 33, 587 und 789 (1932)
- [48] Nordheim, L., Fues, E.: Die Hamilton-Jacobische Theorie der Dynamik. In: Handbuch der Physik Band V. Berlin: Springer 1927

- [49] Ono, S.: Mem. Fac. Eng. Kyushu Univ. 11, 125 (1949)
- [50] la Pars, L.A.: A Treatise on Analytical Dynamics. London: Heinemann 1965
- [51] Percival, E.C.: J. Math. Phys. 2, 235 (1961)
- [52] Poincaré, H.: Journ. de Phys. 5, 369 (1906)
- [53] Prigogine, I.: Introduction to Nonequilibrium Statistical Physics. In: Topics in Nonlinear Physics, ed. N.J. Zabusky. Berlin: Springer 1968
- [54] Prigogine, I., George, C., Henin, F.: Physica 45, 418 (1969)
- [55] Prosser, R.T.: J. Math. Phys. 10, 2233 (1969)
- [56] — J. Math. Phys. 13, 186 (1972)
- [57] Rahman, A.: Phys. Rev. 136, A405 (1964)
- [58] Reed, M., Simon, B.: Functional Analysis. New York: Academic Press 1972
- [59] Ruelle, D.: Statistical Mechanics. Amsterdam: W.A. Benjamin 1969
- [60] Sengers, J.V.: The Three-Particle Collision Term in the Generalized Boltzmann Equation. In: The Boltzmann-Equation, ed. E.G.D. Cohen, W. Thirring. Wien: Springer 1973
- [61] Silberstein, A.: Nuov. Cim. 11, 21 (1905)
- [62] Sinai, J.G.: Ergodicity of Boltzmann's Gas Model. In: Statistical Mechanics: Foundations and Applications, ed. T.A. Bak. New York: W.A. Benjamin 1967
- [63] — Ergodic Theory. In: The Boltzmann Equation, ed. E.G.D. Cohen, W. Thirring. Wien: Springer 1973
- [64] Swendsen, R.H.: J. Stat. Phys. 8, 293 (1973)
- [65] Synge, J.L.: Proc. Roy. Irish Acad. A64, 1 (1964)
- [66] Truesdell, C.: Ergodic Theory in Classical Statistical Mechanics. In: Proceedings of the International School of Physics "Enrico Fermi" XIV, ed. P. Caldirola. New York: Academic Press 1960

- [67] Verlet, L.: Phys. Rev. 159, 98 (1967)
- [68] Wightman, A.S.: Statistical Mechanics and Ergodic Theory.
In: Statistical Mechanics at the Turn of the Decade, ed. E.G.D. Cohen. New York: Marcel Dekker 1971
- [69] Wood, W.W.: Computer Studies in Statistical Mechanics. In: Proceedings of the International Summerschool on Fundamental Problems in Statistical Mechanics III, Wageningen, 1974. Amsterdam: North-Holland to appear
- [70] Zermelo, E.: Wied. Ann. 57, 485 (1896)
- [71] — Jahresber. der Math. Ver. 15, 232 (1906)
- [72] Zwanzig, R.: Concept of Irreversibility in Statistical Mechanics. In: Proceedings of the International Conference on Thermodynamics, Cardiff, ed. P.T. Landsberg. London: Butterworths 1970

Danksagung

Ich danke Herrn Prof. Dr. G. Süßmann für die freundliche Unterstützung der vorliegenden Arbeit und für die zahlreichen anregenden Diskussionen.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Priv.-Doz. Dr. W. Ochs für die vielen wertvollen Anregungen und klärenden Unterhaltungen bei der Betreuung der Arbeit.

Lebenslauf

Ich wurde am 1. November 1946 als zweiter Sohn des Diplomvolkswirts Dr. Karl Spohn und dessen Ehefrau Dr. Ortrud Spohn, geb. Knopp, in Tübingen geboren. Nach unserem Umzug nach Stuttgart besuchte ich das dortige Dillmann-Gymnasium, an dem ich im April 1966 die Reifeprüfung ablegte. Im Sommersemester 1966 begann ich mit dem Studium der Physik an der Universität Stuttgart. Nach einer einjährigen Unterbrechung zur Ableistung des Grundwehrdienstes setzte ich dieses fort und bestand im April 1969 die Vordiplomsprüfung. Im akademischen Jahr 1969/70 studierte ich an der Oregon State University, Corvallis, USA, und war in dem dortigen Physik-Department gleichzeitig als teaching assistant tätig. Nach meiner Rückkehr setzte ich mein Studium an der Ludwig-Maximilians-Universität München fort und begann unter Anleitung von Herrn Prof. Dr. G. Süßmann meine Diplomarbeit mit dem Titel "Kann die Quantenmechanik den Meßvorgang exakt beschreiben?". Im Juli 1972 legte ich die Diplomhauptprüfung ab. Anschließend begann ich mit meiner Dissertation, die aus den Mitteln des Graduiertenförderungsgesetzes gefördert wurde.

